

УДК 539.8 (075.8)

КП

№ держреєстрації 0110U006721

Інв. №

Міністерство освіти і науки України

Сумський державний університет (СумДУ)

40007, м. Суми, вул. Р.-Корсакова, 2: тел. (0542) 33-41-08, факс (0542) 33-40-49

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з

наукової роботи

доктор фіз.-мат. наук

_____ А.М. Черноус

ЗВІТ

ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ

**ВПЛИВ КОРЕЛЯЦІЙ ТЕМПЕРАТУРИ МАСТИЛА ТА ГІСТЕРЕЗИСНИХ ЯВИЩ
НА ДИНАМІКУ МЕЖОВОГО ТЕРТЯ У НАНОПРИСТРОЯХ**

(заключний)

Начальник НДЧ

канд. техн. наук, професор

_____ В.А. Осіпов

Керівник НДР

докт. фіз.-мат. наук, доцент

_____ О.В. Хоменко
(2010.12.20)

2010

Рукопис закінчено 2010.12.20 р.

Результати цієї роботи розглянуто на засіданні наукової ради СумДУ,

протокол № 5 від 16.12.2010

СПИСОК ВИКОНАВЦІВ

Старший науковий співробітник кандидат ф.-м. н.	(2010.12.20)	Я.О. Ляшенко (розд. 1,2,4).
Старший науковий співробітник кандидат ф.-м. н.	(2010.12.20)	Л.С. Метлов (розд. 4).
Старший науковий співробітник кандидат ф.-м. н.	(2010.12.20)	І.В. Коплик (розд. 1).
Аспірант	(2010.12.20)	Н.В. Проданов (розд. 3).
Студент	(2010.12.20)	С.М. Чепульський (розд. 4).
Студент	(2010.12.20)	Ю.В. Щербак (розд. 3).

РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 90 с., 56 рис., 78 джерел.

Об'єкт дослідження – фізичні процеси в трибологічних системах при режимі граничного тертя, а саме, режими переривчастого плавлення ультратонкої плівки мастила.

Мета роботи – дослідження граничного режиму тертя, який реалізується у разі ультратонких плівок масла завтовшки менш чотирьох діаметрів молекул, при гладких або шорстких поверхнях, високих навантаженнях і малих швидкостях зсуву. При врахуванні деформаційного дефекту модуля зсуву побудувати модель плавлення мастила та дослідити гістерезисні явища при терті. Враховуючи флуктуації температури мастила побудувати динамічну фазову діаграму із різними кінетичними режимами тертя у звичайному випадку та у самоподібному режимі. Також методом молекулярної динаміки дослідити поведінку межової плівки води, молекули якої представлені моделлю TIP4P, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями.

Метод дослідження – теоретичний аналіз що базується на системі реологічних рівнянь для апроксимації в'язко-пружного середовища та теорії фазових переходів Ландау, комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки.

Досліджено межовий режим тертя. Визначено параметри, за яких плівка знаходиться в рідноподібному стані, і тертя між поверхнями зменшується. При врахуванні корельованих флуктуацій температури знайдено області реалізації сухого, рідинного та переривчастого тертя. Проведено врахування деформаційного дефекту модуля зсуву мастила на плавлення. Побудовано фазові портрети у різних кінетичних режимах та фазова діаграма. Досліджено самоподібний режим плавлення мастила. Вивчено рівноважні й динамічні характеристики ультратонкої плівки води, стиснутої між алмазними стінками, в залежності від зовнішнього навантаження, зсувної сили, товщини плівки і рельєфу поверхонь. Побудовано фазову діаграму із областями рідинного та сухого тертя у моделі фазових переходів. Досліджено кінетику системи на прикладі механічного аналога простої трибологічної моделі.

ЗСУВНІ НАПРУЖЕННЯ І ДЕФОРМАЦІЇ, КРИТИЧНА ТЕМПЕРАТУРА, ГІСТЕРЕЗИС, ФАЗОВИЙ ПЕРЕХІД, БЕЗПЕРЕРВНЕ І СТИБКОПОДІБНЕ ПЛАВЛЕННЯ, СИЛА ТЕРТЯ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА.

ЗМІСТ

ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1 ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КОРЕЛЬОВАНИХ ФЛУКТУАЦІЙ ТЕМПЕРАТУРИ НА ПРОЦЕС ПЛАВЛЕННЯ	8
1.1. Представлення кольорового шуму і основні рівняння	8
1.2. Метод ефективного потенціалу	14
1.3. Безперервне перетворення	17
1.3.1. Динамічна фазова діаграма	17
1.3.2. Фазова кінетика	19
1.4. Врахування деформаційного дефекту модуля зсуву	23
1.4.1. Динамічна фазова діаграма	23
1.4.2. Фазова кінетика	25
1.5. Самоподібна поведінка	27
1.5.1. Безперервне перетворення	27
1.5.2. Врахування деформаційного дефекту модуля зсуву	31
РОЗДІЛ 2 ГІСТЕРЕЗИСНІ ЯВИЩА ПРИ ПЛАВЛЕННІ УЛЬТРАТОНКОЇ ПЛІВКИ МАСТИЛА	36
2.1. Основні рівняння	36
2.2. Гістерезисні явища при фазовому переході другого роду	38
2.2.1. Стрибкоподібне плавлення	38
2.2.2. Безперервне перетворення	42
2.2.3. Фазова кінетика	43
2.2.3.1. Координати $\sigma - \varepsilon$	43
2.2.3.2. Координати $\dot{\sigma} - \sigma$	45
2.3. Гістерезисні явища при фазовому переході першого роду	47
2.3.1. Стрибкоподібне плавлення	47
2.3.2. Фазова кінетика	48

РОЗДІЛ 3	МОДЕЛЮВАННЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ УЛЬТРАТОНКОГО ШАРУ ВОДИ, СТИСНУТОГО МІЖ ЖОРСТКИМИ АЛМАЗНИМИ ПОВЕРХНЯМИ	52
3.1.	Властивості тонких плівок рідин, обмежених твердими поверхнями	52
3.2.	Модель	54
3.2.1.	Загальна схема комп'ютерного експерименту	54
3.2.2.	Модель води	55
3.2.3.	Рівняння руху	57
3.2.4.	Контроль температури	59
3.2.5.	Особливості вимірювань	60
3.3.	Результати й обговорення	61
3.3.1.	Плівка води між гладенькими поверхнями	61
3.3.2.	Плівка води між поверхнями із періодичним атомарним рельєфом	67
РОЗДІЛ 4	БАГАТОВИМІРНИЙ ТЕРМОДИНАМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ДЛЯ ОПИСУ ПЛАВЛЕННЯ УЛЬТРАТОНКОЇ ПЛІВКИ МАСТИЛА У НАНОПРИСТРОЯХ	71
4.1.	Основні рівняння	71
4.2.	Сила тертя	74
4.3.	Трибологічна система	77
ВИСНОВКИ		82
СПИСОК ДЖЕРЕЛ		86

ВСТУП

Останніми роками інтенсивно проводиться експериментальне дослідження процесу тертя і реологічних властивостей молекулярно-тонких шарів між двома атомарно-гладкими поверхнями при різних величинах прикладеного навантаження, тиску, товщини шарів при зміні зсувної швидкості, температури і так далі. Експерименти вказують на ряд незвичайних властивостей подібних систем, зокрема на існування твердо- і рідиноподібного станів, характеристики яких відрізняються від звичайних твердих і рідких систем.

Розділ 1 присвячений опису впливу корельованих флуктуацій температури на плавлення плівки мастила. Кореляцію флуктуацій можна представити як кольоровий шум [1]. Як правило, кожному шумовому сигналові приписується певний колір, згідно його властивостям. Одна з таких властивостей — спектральна густина потужності. Для білого шуму спектральна густина $S(f)$ є постійною, тобто всі частоти представлені однаково. Для кольорового шуму залежність $S(f)$ може приймати різний вигляд залежно від його кольору. По аналогії з видимим світлом, яке є електромагнітним полем і представляється частотою, кольірні відповідності шумових сигналів визначаються частотами аналогічного електромагнітного сигналу. Наприклад, червоний шум відповідає електромагнітному сигналу, що має довжину хвилі видимого червоного світла. Далі показано, що кореляції температури представляють процес Орнштейна-Уленбека, що описує броунівський рух (червоний або коричневий шум). Його спектральна густина обернено пропорційна квадрату частоти. Врахування такого виду шумів описує ефекти пам'яті — кожне значення шумлячого сигналу залежить від попереднього, тобто шум є корельованим. Дані ефекти мають місце при плавленні тонкої плівки мастила. Також введення кореляцій температури дозволяє показати, що при плавленні мастила існує декілька стаціонарних режимів, переходи між якими забезпечують різні режими переривчастого тертя, що спостережуються експериментально.

У розділі 2 досліджується вплив деформаційного дефекту модуля зсуву мастила на процеси, що мають місце в системі. Встановлена можливість реалізації стрибкоподібного і безперервного плавлення. Виявлено три режими поведінки мастила, які відповідають нульовим зсувним напруженням, гуківській ділянці діаграми навантаження і ділянці пластичної течії. Переходи між цими режимами можуть відбуватися за механізмами фазового перетворення першого і другого роду. Описано гістерезис залежностей стаціонарних напружень від деформації і температури поверхонь тертя. Досліджено фазову кінетику системи. Показано, що співвідношення часів релаксації досліджуваних величин якісним чином впливає на характер встановлення стаціонарного режиму.

У розділі 3 методом молекулярної динаміки досліджено поведінку межової плівки води, молекули якої представлені моделлю TIP4P, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями. Вивчено рівноважні й динамічні характеристики системи в залежності від зовнішнього навантаження, зсувної сили, товщини плівки і рельєфу поверхонь. Встановлено перехід ультратонкої

плівки води до твердоподібного стану із збільшенням зовнішнього навантаження. Це виявляється у зменшенні коефіцієнту дифузії й утворенні молекулами рідини квазідискретних шарів. У плівці товщиною два молекулярних діаметри за високих навантажень молекули також упорядковуються паралельно до поверхонь. Отримано часові залежності сили тертя і зміни її середнього значення із навантаженням. Виявлено значний вплив рельєфу поверхонь на характер впорядкування молекул плівки води. У цілому, поведінка розглядуваної моделі узгоджується із експериментами для простих рідин, молекули яких мають сферичну форму.

У розділі 4 побудовано детерміністичну теорію плавлення ультратонкої плівки мастила, яку затиснуто між двома атомарно-гладкими твердими поверхнями. Для опису стану мастила введено параметр надлишкового об'єму, що виникає за рахунок хаотизації структури твердого тіла в процесі плавлення. Узгодженим чином описано термодинамічне і зсувне плавлення. Проаналізовано залежності стаціонарної сили тертя від температури мастила і швидкості зсуву поверхонь, що труться, при їх рівномірному зсуві із постійною швидкістю. В рамках простої трибологічної моделі описано переривчастий режим тертя, при якому мастило періодично плавиться і твердне. Проаналізовано вплив швидкості, температури і навантаження на переривчасте тертя. Проведено якісне порівняння отриманих результатів із експериментальними даними.

Перший та другий розділи присвячені дослідженню у рамках реологічної моделі що базується на системі рівнянь типу Лоренца. Третій розділ подає дослідження за допомогою методів молекулярної динаміки. Останній четвертий розділ містить теорію що базується та теорії фазових переходів Ландау та представляє термодинамічний підхід до вивчення проблеми. Таким чином, один і той самий об'єкт досліджуються у рамках трьох різноманітних теорій, що безсумнівно є перевагою, оскільки дозволяє робити порівняння у результатах та більш детально вивчити об'єкт дослідження.

РОЗДІЛ 1

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КОРЕЛЬОВАНИХ ФЛУКТУАЦІЙ ТЕМПЕРАТУРИ НА ПРОЦЕС ПЛАВЛЕННЯ

Шуми вводяться для вирішення завдань з великою кількістю неоднорідностей, дефектів, зовнішніх дій і так далі. Коли не можна описати всі існуючі взаємодії якимось об'єктивно. У даному розділі проведений аналіз впливу корельованого шуму температури на процес плавлення ультратонкої плівки мастила. Оскільки система має малі розміри, вплив шуму виявляється істотним, і для повноти аналізу його необхідно врахувати. Врахування шуму дозволяє описати переривчастий stick-slip режим.

1.1. Представлення кольорового шуму і основні рівняння

Продовжимо дослідження системи рівнянь, що описує плавлення ультратонкої плівки мастила з температурою T , затиснутою між двома атомарно-гладкими поверхнями з температурою T_e [2]:

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma + g\varepsilon, \quad (1.1)$$

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)\sigma, \quad (1.2)$$

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma\varepsilon + \sigma^2, \quad (1.3)$$

де константа $g < 1$. Ці рівняння формально збігаються з синергетичною системою Лоренца [3], у якій зсувні напруження σ грають роль параметра порядку, спряжене поле зводиться до зсувної деформації ε , а температура T представляє керуючий параметр.

Можливий випадок, коли сила тертя змінюється в часі випадковим чином. Такий режим виявлений методами молекулярної динаміки [4] і показаний на рис. 1.1. Подібний нерегулярний режим спостерігався в експериментах [5], у яких як мастило використовувалася плівка тетрадекана товщиною 0.8 нм, що відповідає двом моношарам речовини, і швидкість зсуву близька до критичного значення. Очевидно, даний режим викликаний флуктуаціями, які виявляються істотними за рахунок малого розміру. Причому флуктуації випробовує також температура мастила T , яка представляє середню величину. З'ясуємо причину таких флуктуацій.

У молекулярній динаміці температура системи вводиться через питома середнє значення кінетичної енергії:

$$E = \frac{\sum_{n=1}^N m_n v_n^2}{2N}, \quad (1.4)$$

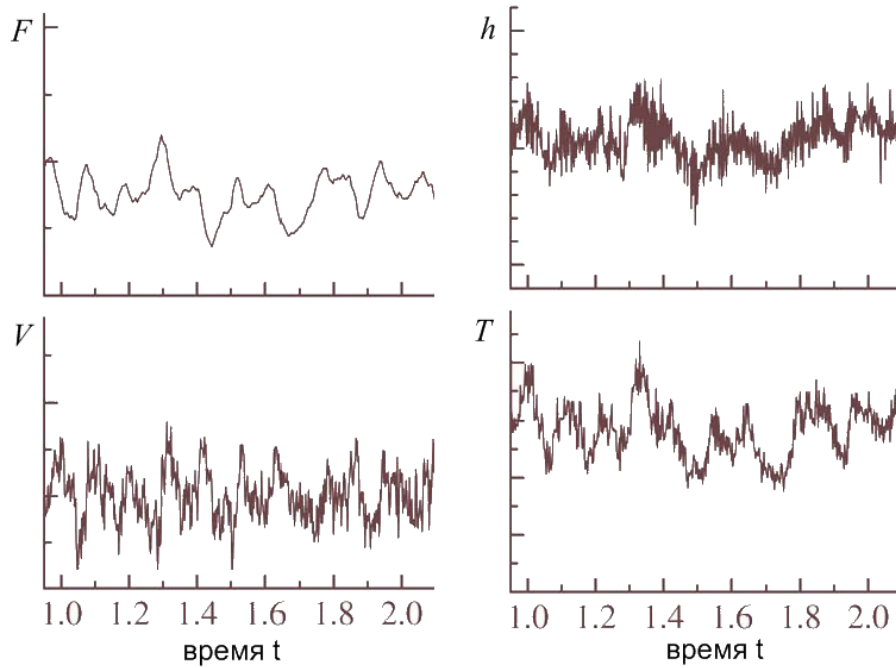


Рисунок 1.1— Часові залежності сили тертя F , швидкості верхньої зсувної поверхні V , товщини мастила h і температури мастила T [4].

де m — молекулярна маса атома, v — його швидкість та N — повне число атомів [6]. Вираз (1.4) представляє середнє значення, біля якого відбуваються флуктуації енергії частинок, що складають систему. При великій кількості частинок система з часом приходить до стану термодинамічної рівноваги, при якій значення (1.4) не змінюється у часі. Проте ми розглядаємо систему, в якій кількість частинок обмежена (плівка мастила має товщину в декілька атомних шарів). Тому значення (1.4) змінюється з часом випадковим чином за рахунок флуктуацій швидкості обмеженого числа частинок і його вже не можна вважати за постійне середнє значення. Таким чином, енергія буде флуктувати. При змінах кінетичної енергії (1.4) потенційна енергія змінюється таким чином, що повна енергія системи завжди залишається постійною.

Кінетична енергія системи і її температура зв'язані наступним співвідношенням:

$$E = \frac{i}{2}kT \quad (1.5)$$

де i — число ступенів свободи (у нашому випадку $i = 3$) k — постійна Больцмана. Порівнюючи (1.4) і (1.5), набуваємо миттєвого значення температури:

$$T = \frac{\sum_{n=1}^N m_n v_n^2}{3kN}. \quad (1.6)$$

Для обчислення температури даної системи необхідно в (1.6) додатково проводити усереднювання за часом. Проте, як показано вище, дане значення для ультратонких плівок не є постійним. Наприклад, коли зсувні напруження перевищують критичне значення, настає плавлення, при якому

швидкості частинок мастила зростають, оскільки система стає менш упорядкованою. Збільшенню флуктуацій також сприяє неоднорідність системи — дефекти кристалічної будови мастила, нерівності поверхонь тертя, домішки у використуваному мастилі, неоднорідний розподіл температури термостата і тому подібне. Вказані ефекти в експериментальних ситуаціях завжди мають місце. Для їх врахування і вводяться в розгляд флуктуації енергії.

Далі розглядається вплив флуктуацій енергії (1.4). Використовуючи лінійний зв'язок між енергією і температурою (1.5), врахуємо флуктуації енергії, увівши флуктуації температури, яка явно входить в еволюційні рівняння. Далі під флуктуаціями температури маються на увазі флуктуації кінетичної енергії частинок мастила. Проте флуктуації температури таким чином можна вводити тільки для ультратонких плівок мастил, що складаються з обмеженого числа частинок.

Флуктуації температури, показані на рис. 1.1, у відмінності від білого шуму, є корельованими. Це витікає з того, що згідно рисунку, якщо температура збільшується, то в наступний момент вірогідність того, що вона продовжуватиме збільшуватися більше, ніж вірогідність її зменшення.

Введемо флуктуації температури слідуючи [1]. Часова кореляція розмірної температури T_D мастила визначається середнім значенням добутку

$$\varphi(\tau) = \langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t + \tau) \rangle, \quad (1.7)$$

де $\Delta T_D(t)$ — різниця між поточною і середньою температурою. В рамках припущення про квазістаціонарність флуктуацій ΔT_D функція $\varphi(\tau)$ набуває вигляду:

$$\varphi(\tau) = \langle (\Delta T_D)^2 \rangle \exp(-\zeta|\tau|). \quad (1.8)$$

Тут $1/\zeta$ задає час релаксації для встановлення рівноваги. Вважаючи, що у формулах (1.7) і (1.8) моменти часу зв'язані рівністю $t + \tau = t'$, отримуємо:

$$\varphi(t' - t) = \langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t') \rangle = \langle (\Delta T_D)^2 \rangle \exp(-\zeta|t' - t|). \quad (1.9)$$

Тоді, підстановка середнього квадрата флуктуацій температури $\langle (\Delta T_D)^2 \rangle = T_D^2/c_v$ у вираз (1.9) дає

$$\langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t') \rangle = \frac{T_D^2}{c_v} \exp(-\zeta|t' - t|). \quad (1.10)$$

Такого типу флуктуації описуються процесом Орнштайна-Уленбека $\lambda(t)$ [7], який має наступні моменти (пор. з (1.10)):

$$\langle \lambda(t) \rangle = 0, \quad \langle \lambda(t) \lambda(t') \rangle = \frac{I}{\tau_\lambda} \exp\left(-\frac{|t - t'|}{\tau_\lambda}\right) \quad (1.11)$$

тут I грає роль інтенсивності флуктуацій температури, а τ_λ — часу їх кореляції. Для опису впливу кореляцій температури процес $\lambda(t)$ далі враховується в безрозмірному рівнянні (1.3) як додатковий температурний доданок. Тому величини λ, I в (1.11) вже виміряні в одиницях

$$\lambda_s = T_c \quad I_s = T_c^2. \quad (1.12)$$

Порівнюючи формулу (1.10) з другою рівністю (1.11), з урахуванням одиниць вимірювання (1.12) отримуємо:

$$\lambda(t) = \Delta T(t) \quad \tau_\lambda = \frac{1}{\zeta}, \quad I = \frac{T^2}{\zeta c_v}. \quad (1.13)$$

Отже, величина інтенсивності шуму I однозначно визначається температурою і теплоємністю мастила c_v . На перший погляд, може здатися, що на приведених далі фазових діаграмах $T_e(I)$ кожному значенню I відповідає єдине T_e , і замість областей повинна існувати крива у вказаних координатах, рух по якій і описує еволюцію системи. Проте, це не має місця, оскільки параметр T_e представляє температуру термостата, яка не визначає однозначно температуру T . Слід лише вважати, що в результаті самоорганізації системи певному значенню T_e може відповідати безліч значень T , і, згідно з (1.13), інтенсивностей I у різні моменти часу. Крім того, до зміни I приводить варіація c_v з часом. Таким чином, доречно говорити про існування фазової діаграми. Інтенсивність I можна також змінювати за рахунок вибору параметра ζ , що характеризує конкретну систему. Останнє означає що в одних системах шум не робить істотного впливу на їх поведінку з часом, а в інших впливає критичним чином.

Проте, тут, не обмежуючись таким підходом, флуктуації температури розуміються в ширшому сенсі. Це пов'язано з тим, що як правило, термічний вплив роблять різні зовнішні стохастичні джерела. Крім того, шум можна рівноправним чином інтерпретувати як при допомозі флуктуацій T , так і T_e . Дане представлення шуму часто використовується при моделюванні його в реальних фізичних системах [7].

Процес Орнштейна-Уленбека $\lambda(t)$ представляє реалізацію корельованих випадкових блукань. Мається на увазі, що із збільшенням швидкості частинки збільшується вірогідність її зіткнення з іншою частинкою. При цьому всі частинки повертаються до нульової швидкості тим швидше, чим більше їх швидкість. Процес є кольоровим гаусовим шумом з ненульовим часом кореляції τ_λ і інтенсивністю I . Він може бути отриманий при розв'язку рівняння Орнштейна-Уленбека:

$$\frac{d\lambda(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau_\lambda}\lambda(t) - \frac{1}{\tau_\lambda}\xi(t), \quad (1.14)$$

де $\xi(t)$ представляє гаусів білий шум з нульовим середнім значенням і інтенсивністю I :

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2I\delta(t - t'). \quad (1.15)$$

При цьому джерело $\lambda(t)$ на великих тимчасових інтервалах подібне білому шуму $\xi(t)$, а на малих — броунівському руху, і в стаціонарній межі ($t, t' \gg \tau_\lambda$) має моменти (1.11).

Помноживши (1.14) на dt отримаємо стохастичне диференціальне рівняння:

$$d\lambda(t) = -\frac{1}{\tau_\lambda}\lambda(t)dt - \frac{1}{\tau_\lambda}dW(t) \quad (1.16)$$

де вінерівський процес володіє властивостями:

$$\langle dW(t) \rangle = 0; \quad \langle (dW(t))^2 \rangle = 2Idt. \quad (1.17)$$

Для чисельної реалізації $\lambda(t)$ розв'яжемо рівняння (1.16), скориставшись при цьому методом Ейлера. З урахуванням визначення дискретного аналогу диференціала випадкової сили $dW(t) \equiv \sqrt{\Delta t}W_n$ отримаємо наступну ітераційну процедуру:

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_\lambda} \right) - \frac{\sqrt{\Delta t}}{\tau_\lambda} W_n. \quad (1.18)$$

Розв'язок проводиться на інтервалі $t \in [0, T]$, і при заданій кількості ітерацій N приріст часу визначається як $\Delta t = T/N$. Випадкова сила W_n володіє наступними властивостями:

$$\langle W_n \rangle = 0, \quad \langle W_n W_{n'} \rangle = 0 \quad \langle W_n^2 \rangle \rightarrow 2I. \quad (1.19)$$

Для її моделювання використовується функція Бокса-Мюллера

$$W_n = \mu \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \quad r_i \in (0, 1], \quad (1.20)$$

де дисперсія $\mu = \sqrt{2}$, а W_n — абсолютно випадкове число із властивостями (1.19). Псевдо-випадкові числа r_1 і r_2 мають рівномірний розподіл і повторюються через певний інтервал.

На рис. 1.2 представлена реалізація (1.20) для різних часових масштабів. Характер поведінки для обох масштабів подібний, шум є некорельованим. Процес Орнштайна-Уленбека $\lambda(t)$ для

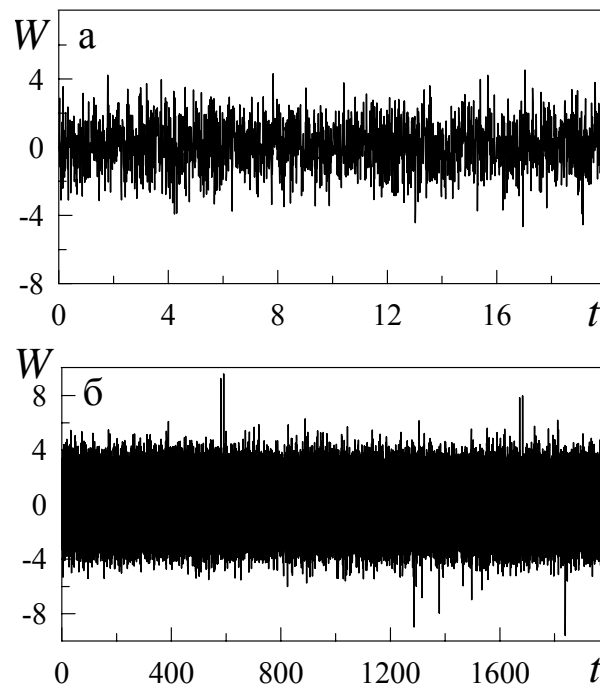


Рисунок 1.2— Реалізація білого шуму (1.20) при $I = 1$ ($\mu^2 = 2I$): а — $N = 2 \cdot 10^3$, $T = 20$, $\Delta t = 0.01$; б — $N = 2 \cdot 10^5$, $T = 2 \cdot 10^3$, $\Delta t = 0.01$.

аналогічних інтервалів часу представлений на рис. 1.3. Видно, що на коротких інтервалах (рис. 1.3а) він подібний броунівському руху, і тут кожне подальше значення залежить від попереднього, тобто шум є корельованим. На довгих же інтервалах (рис. 1.3б) кореляція втрачається, процес стає подібним до білого шуму, реалізація якого показана на рис. 1.2. Оскільки, на відміну від білого шуму

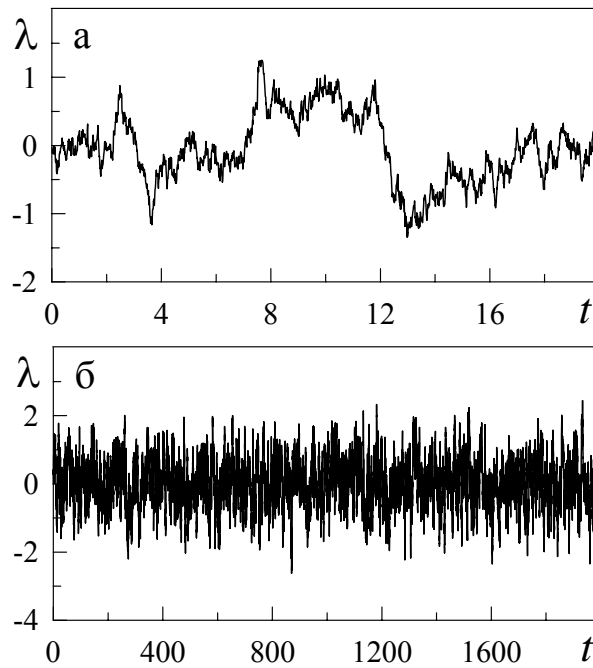


Рисунок 1.3— Реалізація кольорового шуму (1.18) при $I = 1$ ($\mu^2 = 2I$), $\tau_\lambda = 2.0$: а — $N = 2 \cdot 10^3$, $T = 20$, $\Delta t = 0.01$; б — $N = 2 \cdot 10^5$, $T = 2 \cdot 10^3$, $\Delta t = 0.01$.

стаціонарний процес Орнштайна-Уленбека має кінцеву дисперсію, його часто використовують як модель реального шумового сигналу.

З урахуванням стохастичного доданку останнє рівняння системи, що розглядається (1.3) приймає вигляд:

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma \varepsilon + \sigma^2 + \lambda(t). \quad (1.21)$$

В рамках адиабатичного наближення

$$\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon, \quad (1.22)$$

коли температура мастила T слідує за зміною зсувних компонент напружень σ і деформації ε , у рівнянні (1.21) можна виділити малий параметр, і покласти $\tau_T \dot{T} \simeq 0$. У результаті отримуємо вираз для температури:

$$T = T_e - \sigma \varepsilon + \sigma^2 + \lambda(t). \quad (1.23)$$

Додамо системі (1.1), (1.2), (1.23) більш простий вигляд, звівши її до єдиного рівняння для зсувних напружень $\sigma(t)$. Рівняння (1.1) дає деформацію

$$\varepsilon = \frac{1}{g} [\sigma + \tau_\sigma \dot{\sigma}], \quad (1.24)$$

а рівності (1.2), (1.23) із врахуванням (1.24) набувають вигляду

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\frac{1}{g} [\sigma + \tau_\sigma \dot{\sigma}] + \sigma \left[T_e - 1 - \frac{\sigma}{g} (\sigma + \tau_\sigma \dot{\sigma}) + \sigma^2 \right] + \sigma \lambda(t), \quad (1.25)$$

$$T = T_e - \frac{\sigma}{g} [\sigma + \tau_\sigma \dot{\sigma}] + \sigma^2 + \lambda(t), \quad (1.26)$$

Підставляючи (1.25) в результат диференціювання виразу (1.24), отримуємо еволюційне рівняння в канонічному вигляді рівняння нелінійного стохастичного осцилятора типу генератора ван дер Поля:

$$m\ddot{\sigma} + \gamma(\sigma)\dot{\sigma} = f(\sigma) + \phi(\sigma)\lambda(t), \quad (1.27)$$

де коефіцієнт тертя γ , сила f , амплітуда шуму ϕ і параметр m , що зводиться до маси системи, визначаються виразами

$$\begin{aligned} \gamma(\sigma) &\equiv \frac{1}{g} [\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)], & f(\sigma) &\equiv \sigma (T_e - 1 - g^{-1}) - \sigma^3 (g^{-1} - 1) \\ \phi(\sigma) &\equiv \sigma, & m &\equiv \frac{\tau_\sigma \tau_\varepsilon}{g}. \end{aligned} \quad (1.28)$$

1.2. Метод ефективного потенціалу

Знайдемо розподіл системи у фазовому просторі, що параметризується узагальненими "координатою" σ і "імпульсом" $p \equiv m\dot{\sigma}$ залежно від часу t . З цією метою скористаємося методом ефективного потенціалу, описаним тут на основі робіт [8, 9]. Представимо рівняння Ейлера (1.27) в гамільтоновій формі

$$\dot{\sigma} = m^{-1}p, \quad \dot{p} = -m^{-1}\gamma(\sigma)p + f(\sigma) + \phi(\sigma)\lambda(t). \quad (1.29)$$

Статистичне дослідження зводиться до визначення функції $\Pi(\sigma, p, t)$, вірогідності наявності значення, що представляє густину напружень σ і швидкості його зміни $\dot{\sigma}$ у заданий момент часу t . Вона є усередненою по шуму λ функцією розподілу $\rho(\sigma, p, t)$ розв'язків системи (1.29):

$$\Pi(\sigma, p, t) = \langle \rho(\sigma, p, t) \rangle. \quad (1.30)$$

Припускаємо, що функція $\rho = \rho(\sigma, p, t)$ задовольняє рівнянню безперервності

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{\partial}{\partial \sigma} (\dot{\sigma} \rho) + \frac{\partial}{\partial p} (\dot{p} \rho) \right] = 0. \quad (1.31)$$

Підставляючи сюди рівність (1.29), приходимо до рівняння Ліувіля

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\hat{L} + \hat{N} \lambda \right) \rho, \quad (1.32)$$

де введені оператори

$$\hat{L} \equiv -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial \sigma} - \frac{\partial}{\partial p} \left(f - \frac{\gamma}{m} p \right), \quad \hat{N} \equiv -\phi \frac{\partial}{\partial p}. \quad (1.33)$$

В рамках представлення взаємодії мікроскопічна функція розподілу визначається виразом $\varpi = e^{-\hat{L}t} \rho$, і рівняння (1.32) приймає вигляд $\partial \varpi / \partial t = \hat{\mathcal{R}} \varpi$, $\hat{\mathcal{R}} \equiv \lambda \left(e^{-\hat{L}t} \hat{N} e^{\hat{L}t} \right)$. Метод кумулянтного

розкладання [10] з точністю до доданків порядку $O(\widehat{\mathcal{R}}^2)$ приводить до лінійного диференціального кінетичного рівняння $\partial\langle\varpi\rangle(t)/\partial t = \left[\int_0^t \langle\widehat{\mathcal{R}}(t)\widehat{\mathcal{R}}(t')\rangle dt' \right] \langle\varpi\rangle(t)$. Перехід від представлення взаємодії до початкового дає рівняння для функції розподілу (1.30)

$$\frac{\partial}{\partial t}\Pi(t) = \left\{ \widehat{L} + \int_0^t \langle\lambda(\tau)\lambda(0)\rangle \left[\widehat{N} \left(e^{\widehat{L}\tau} \widehat{N} e^{-\widehat{L}\tau} \right) \right] d\tau \right\} \Pi(t). \quad (1.34)$$

Враховуючи, що фізичний час t набагато перевищує час кореляції шуму τ_λ , верхню межу інтегрування можна покласти рівною ∞ . Тоді розкладання експонент в (1.34) приводить до виразу

$$\frac{\partial\Pi}{\partial t} = \left(\widehat{L} + \widehat{\Lambda} \right) \Pi, \quad (1.35)$$

де оператор розсіяння

$$\widehat{\Lambda} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \widehat{\Lambda}^{(n)}, \quad \widehat{\Lambda}^{(n)} \equiv C^{(n)} \left(\widehat{N} \widehat{L}^{(n)} \right) \quad (1.36)$$

визначається комутаторами по рекурентній формулі

$$\widehat{L}^{(n+1)} = [\widehat{L}, \widehat{L}^{(n)}], \quad \widehat{L}^{(0)} \equiv \widehat{N} \quad (1.37)$$

($[\widehat{A}, \widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$) і моментами кореляційної функції (1.11)

$$C^{(n)} = \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} \tau^n \langle\lambda(\tau)\lambda(0)\rangle d\tau. \quad (1.38)$$

Перші з них рівні

$$C^{(0)} = I, \quad C^{(1)} = I\tau_\lambda. \quad (1.39)$$

У загальному випадку подальший розгляд не представляється можливим, тому скористаємося спрощуючим припущенням, яке полягає в виділенні малого параметра $\epsilon \ll 1$, співпадаючого з числом Кубо [10]. Вважаючи в рівнянні (1.27) коефіцієнт $m = \epsilon^2$ і вимірюючи узагальнений "імпульс" у одиницях ϵ , досліджуємо випадок передемпфованого осцилятора, в якому сила рідкого тертя перевершує решту складових в $\epsilon^{-1} \gg 1$ разів. Тоді рівняння (1.29) набувають вигляду

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} = \epsilon^{-1}p \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\epsilon^{-2}\gamma(\sigma)p + \epsilon^{-1} [f(\sigma) + \phi(\sigma)\lambda(t)]. \quad (1.40)$$

Відповідне рівняння Фоккера–Планка (1.35) записується у формі

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \widehat{L} \right) \Pi = \epsilon^{-2} \widehat{\Lambda} \Pi, \quad (1.41)$$

де оператор $\widehat{L} \equiv \epsilon^{-1}\widehat{L}_1 + \epsilon^{-2}\widehat{L}_2$ складається з компонент $\widehat{L}_1 \equiv -p(\partial/\partial\sigma) - f(\partial/\partial p)$, $\widehat{L}_2 \equiv \gamma(\partial/\partial p)p$. Оператор розсіяння $\widehat{\Lambda}$ визначається виразами (1.33)–(1.36) — (1.38) і з точністю до доданків другого порядку малості має вигляд

$$\widehat{\Lambda} = (C^{(0)} + \gamma C^{(1)}) \phi^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} + \epsilon C^{(1)} \phi^2 \left[-\frac{1}{\phi} \left(\frac{\partial\phi}{\partial\sigma} \right) \left(\frac{\partial}{\partial p} + p \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right) + \frac{\partial^2}{\partial\sigma\partial p} \right] + O(\epsilon^2). \quad (1.42)$$

Оскільки плавлення мастила характеризується напруженнями σ і часом t , то розглянемо проекцію функції розподілу на напівпростір (σ, t) . Для цього перейдемо до рівняння Фоккера-Планка відносно функції $P(\sigma, t)$, використовуючи моменти початкового розподілу $P_n(\sigma, t) \equiv \int p^n \Pi(\sigma, p, t) dp$ нульовою з яких дає необхідний результат. Умножаючи рівняння (1.41) на p^n і інтегруючи по всіх імпульсах приходимо до рекурентного співвідношення

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \frac{\partial P_n}{\partial t} - n\gamma P_n + \epsilon \left(\frac{\partial P_{n+1}}{\partial \sigma} + n f P_{n-1} \right) &= n(n-1) (C^{(0)} + \gamma C^{(1)}) \phi^2 P_{n-2} + \\ &+ \epsilon n C^{(1)} \left[\phi^2 \frac{\partial P_{n-1}}{\partial \sigma} - n \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \right) P_{n-1} \right] + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (1.43)$$

Далі на основі ієрархічного підходу до (1.43) запишемо рівняння Фоккера-Планка. При $n = 0$ отримуємо рівняння для шуканої функції $P = P_0(\sigma, t)$:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\epsilon^{-1} \frac{\partial P_1}{\partial \sigma}. \quad (1.44)$$

Момент першого порядку P_1 задається рівністю

$$P_1 = \frac{\epsilon}{\gamma} \left\{ f P + \frac{\partial P_2}{\partial \sigma} - C^{(1)} \left[\phi^2 \frac{\partial P}{\partial \sigma} - \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \right) P \right] \right\}, \quad (1.45)$$

наступним з (1.43), де належить $n = 1$ і враховуються члени першого порядку по $\epsilon \ll 1$. Облік членів нульового порядку по ϵ при $n = 2$ дозволяє записати вираз для моменту другого порядку P_2 :

$$P_2 = - \left(\frac{C^{(0)}}{\gamma} + C^{(1)} \right) \phi^2 P. \quad (1.46)$$

В результаті рівняння Фоккера-Планка

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \sigma} (D^{(1)} P) + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(D^{(2)} \frac{\partial P}{\partial \sigma} \right) \quad (1.47)$$

виражається через коефіцієнти дрейфу і дифузії

$$D^{(1)} = \frac{1}{\gamma} \left\{ f - C^{(0)} \phi^2 \frac{\partial \gamma^{-1}}{\partial \sigma} - \phi \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \left(\frac{2C^{(0)}}{\gamma} + C^{(1)} \right) \right\}, \quad (1.48)$$

$$D^{(2)} = \frac{\phi^2}{\gamma} \left(\frac{C^{(0)}}{\gamma} + 2C^{(1)} \right). \quad (1.49)$$

Стационарний розв'язок рівняння (1.47) приводить до розподілу

$$P(\sigma) = \mathcal{Z}^{-1} \exp \{-E(\sigma)\} \quad (1.50)$$

з ефективним потенціалом

$$E(\sigma) = - \int_0^\sigma \frac{D^{(1)}(x)}{D^{(2)}(x)} dx \quad (1.51)$$

і нормуючою постійною \mathcal{Z} .

1.3. Безперервне перетворення

1.3.1. Динамічна фазова діаграма

Підставляючи у вирази (1.48), (1.49) співвідношення (1.28) знайдемо коефіцієнти дрейфу і дифузії в явному вигляді:

$$D^{(1)} = \frac{g}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} \left\{ \sigma^3 \left[\frac{2Ig\tau_\sigma}{[\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)]^2} + \frac{g-1}{g} \right] + \sigma \left[T_e - \frac{1+g}{g} - \frac{2Ig}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} - I\tau_\lambda \right] \right\}, \quad (1.52)$$

$$D^{(2)} = \frac{Ig\sigma^2}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} \left[\frac{g}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} + 2\tau_\lambda \right]. \quad (1.53)$$

Розподіл (1.50), показаний на рис. 1.4, має максимуми, положення яких визначаються набором величин $T_e, g, I, \tau_\lambda, \tau_\varepsilon$ і τ_σ . При малих значеннях температури поверхонь T_e реалізується єдиний макси-

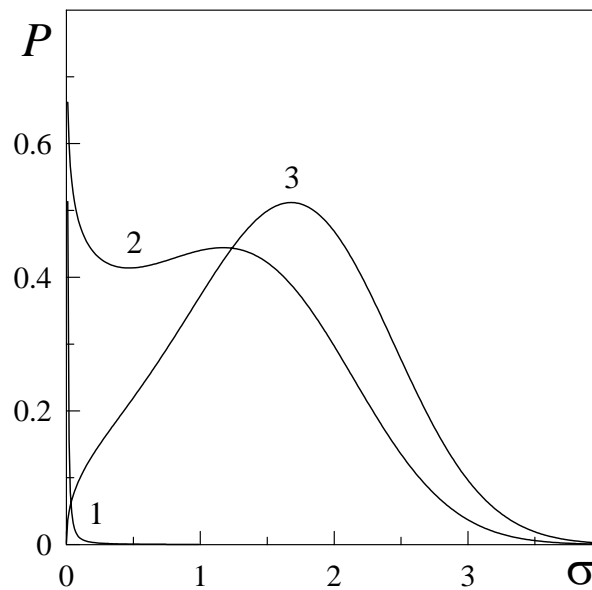


Рисунок 1.4— Функція розподілу зсувних напружень (1.50) для переходу другого роду при $g = 0.2$, $\tau_\sigma = \tau_\varepsilon = 0.1$, $\tau_\lambda = 0.2$ і $I = 5$. Криві 1, 2, 3 відповідають температурам $T_e = 5, 16, 20$ відповідно.

мум в точці $\sigma_0 = 0$, відповідаючий твердоподібному стану мастила і режиму сухого тертя (крива 1). Із зростанням T_e з'являються два максимуми в точках $\sigma_0 = 0$ і $\sigma_0 \neq 0$ (крива 2), перший з них відповідає сухому тертю, другий — ковзанню поверхонь. Тут реалізується режим переривчастого (stick-slip) руху, при якому відбуваються періодичні переходи між вказаними динамічними режимами тертя. Це характерно для режиму перемижання при плавленні мастила, коли має місце суміш твердоподібного і рідиноподібного станів. З подальшим збільшенням T_e максимум $P(\sigma)$ при нульовому значенні напружень зникає (крива 3), і спостерігається режим рідинного тертя, відповідаючий ковзанню.

Стационарний стан зсувних напружень визначається умовою екстремуму розподілу (1.50)

$$\frac{D^{(1)}(\sigma)}{D^{(2)}(\sigma)} = 0. \quad (1.54)$$

Підставляючи сюди вирази (1.52), (1.53), приходимо до рівняння

$$\left[T_e - \frac{1+g}{g} - \sigma^2 \left(\frac{1-g}{g} \right) - I\tau_\lambda \right] [\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)]^2 - 2Ig(\tau_\varepsilon + \tau_\sigma) = 0. \quad (1.55)$$

Його розв'язок показаний на рис. 1.5, згідно з яким зростання інтенсивності шуму I призводить до появи на монотонній залежності $\sigma_0(T_e)$ двозначної ділянки, властивої переходам першого роду.

Вважаючи в (1.55) $\sigma = 0$, знаходимо граничне значення температури поверхонь тертя

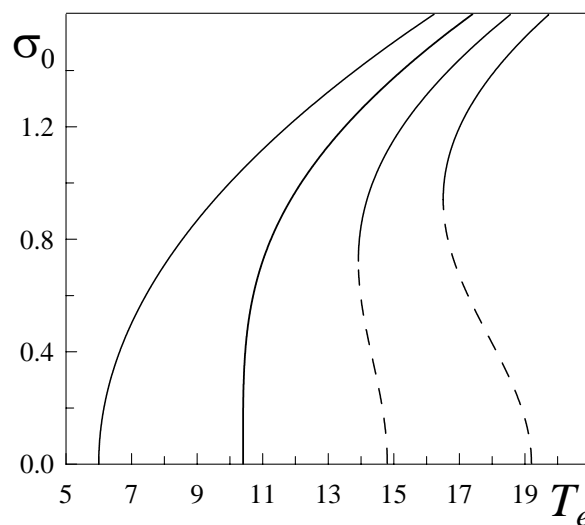


Рисунок 1.5— Залежність стаціонарного значення зсувних напружень σ_0 від температури T_e при параметрах рис. 1.4 і $I = 0, 2, 4, 6$ (відповідні криві розташовані зліва направо).

$$T_{e0} = \frac{1+g}{g} + \left(\tau_\lambda + \frac{2g}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma} \right) I \quad (1.56)$$

яке забезпечує перехід системи до рідинного режиму тертя. Видно, що T_{e0} росте при збільшенні інтенсивності шуму I і часу кореляції τ_λ . Зворотним чином впливають величини часів релаксації зсувних напружень і деформації. На фазовій діаграмі, приведений на рис. 1.6, реалізуються області сухого (DF), рідинного (SF) і переривчастого (SS) режимів тертя. Зростання часу кореляції τ_λ призводить до збільшенню значення T_e , що відповідає трикритичній точці T при певній інтенсивності I . При цьому область сухого тертя розширюється а рідинне і переривчасте тертя стає все більш важко реалізуєним оскільки настає при більшому значенні T_e .

Очевидно, що збільшення температури зсувних поверхонь T_e переводить мастило в рідино-подібний стан. Це видно також з рівняння (1.27), що описує затухаючі коливання. Тут температура поверхонь входить тільки у вираз для сили f , значення якої зростає із зростанням T_e . Як видно з фазових портретів на рис. 1.7, рідиноподібний стан відповідає коливанням з великою амплітудою. Із збільшенням ефективної сили в (1.27) амплітуда коливань збільшується, і реалізується триваліший коливальний процес, до устанавлення певного режиму тертя в системі.

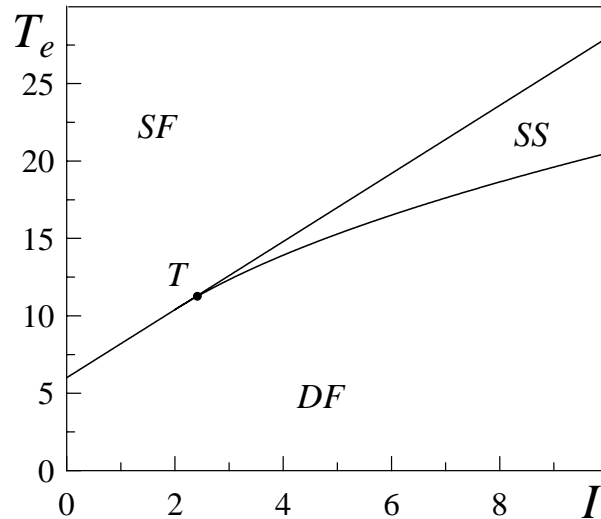


Рисунок 1.6— Фазова діаграма, що відповідає параметрам рис. 1.4 з областями рідинного (SF), сухого (DF) і переривчастого (SS) тертя (T — трикритична точка).

1.3.2. Фазова кінетика

Для з'ясування динаміки зміни режимів тертя досить представити розподіл $P(\sigma)$ положенням його максимуму $\tilde{\sigma}$. Це досягається використанням формалізму інтегралів по траєкторіях [11, 12], в рамках якого екстремальні значення $\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}(t)$ початкової функції розподілу (1.50) еволюціонують у згоді з ефективним розподілом

$$\Pi\{\dot{\tilde{\sigma}}, \tilde{\sigma}\} \propto \exp\left(-\int \Lambda(\dot{\tilde{\sigma}}, \tilde{\sigma}, t) dt\right). \quad (1.57)$$

Тут функція Онзагера–Махлупа Λ , граюча роль лагранжиана евклидової теорії поля, підлягає знаходженню.

Спершу початкове рівняння Фоккера–Планка (1.47) перетворимо до форми Іто, використовуючи інтегрування по частинах:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \sigma} \left[\left(D^{(1)} + \frac{\partial D^{(2)}}{\partial \sigma} \right) P \right] + \frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} (D^{(2)} P). \quad (1.58)$$

Для знаходження залежності $\Lambda(\dot{\tilde{\sigma}}, \tilde{\sigma}, t)$ використовуємо диференціальне співвідношення Ланжевена

$$d\tilde{\sigma} = \left(D^{(1)} + \frac{\partial D^{(2)}}{\partial \sigma} \right) dt + \sqrt{2D^{(2)}} dW(t); \quad (1.59)$$

яке відповідає рівнянню (1.58) [11].

Вінерівський процес $dW(t)$ тут має властивості:

$$\langle dW(t) \rangle = 0, \quad \langle (dW(t))^2 \rangle = dt. \quad (1.60)$$

Особливість стохастичних рівнянь полягає в тому, що диференціал $dW(t)$ не може бути визначений простим діленням рівності (1.59) на $\sqrt{2D^{(2)}}$. З цією метою слід перейти від випадкового

процесу $\tilde{\sigma}(t)$ до білого шуму $x(t)$, пов'язаному з початковим якобіаном

$$\frac{dx}{d\tilde{\sigma}} = (2D^{(2)})^{-1/2}; \quad (1.61)$$

Тоді підстановка рівності (1.59) в стохастичний диференціал Іто

$$dx = \frac{dx}{d\tilde{\sigma}} d\tilde{\sigma} + \frac{1}{2} \frac{d^2x}{d\tilde{\sigma}^2} (d\tilde{\sigma})^2 \quad (1.62)$$

приводить з врахуванням (1.60) до виразу

$$dx = \left(\frac{dx}{d\tilde{\sigma}} \left(D^{(1)} + \frac{\partial D^{(2)}}{\partial \tilde{\sigma}} \right) + \frac{d^2x}{d\tilde{\sigma}^2} D^{(2)} \right) dt + \frac{dx}{d\tilde{\sigma}} \sqrt{2D^{(2)}} dW(t); \quad (1.63)$$

Тут опущені доданки, порядок яких перевищує $(dW(t))^2$. Після зворотного переходу від білого шуму $x(t)$ до початкового процесу $\tilde{\sigma}(t)$ отримуємо рівність

$$\frac{dW(t)}{dt} = \frac{\dot{\tilde{\sigma}}}{\sqrt{2D^{(2)}}} - \frac{2D^{(1)} + (D^{(2)})'}{2\sqrt{2D^{(2)}}}; \quad (1.64)$$

де штрих означає диференціювання по $\tilde{\sigma}$. Підставляючи цей вираз в гауссіан

$$\Pi \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int \left(\frac{dW(t)}{dt} \right)^2 dt \right\},$$

після порівняння з (1.57) приходимо до лагранжиану

$$\Lambda = \frac{1}{4} \frac{\dot{\tilde{\sigma}}^2}{D^{(2)}} - U \quad (1.65)$$

з потенціальною енергією у вигляді

$$U = -\frac{(2D^{(1)} + (D^{(2)})')^2}{16D^{(2)}}. \quad (1.66)$$

Видно, що потенціальна енергія U не збігається з ефективним потенціалом (1.51), і для подальшого розгляду необхідно провести заміну виразу U (1.66) на $E(\tilde{\sigma})$ (1.51). У такому випадку лагранжіан (1.65) описуватиме поведінку системи згідно з отриманим раніше розподілом (1.50).

Кінетика системи визначається рівнянням Ейлера–Лагранжа

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \tilde{\sigma}} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{\tilde{\sigma}}} = \frac{\partial R}{\partial \dot{\tilde{\sigma}}}. \quad (1.67)$$

У представленні білого шуму дисипативна функція має просту форму $R = \dot{x}^2/2$, а з переходом до змінної $\dot{\tilde{\sigma}} = (2D^{(2)})^{1/2} \dot{x}$ набуває вигляду

$$R = \frac{\dot{\tilde{\sigma}}^2}{4D^{(2)}}. \quad (1.68)$$

Підставляючи в (1.67) рівності (1.65), (1.51), (1.68), приходимо до диференціального рівняння

$$\ddot{\tilde{\sigma}} + \dot{\tilde{\sigma}}^2 \frac{(D^{(2)})'}{2D^{(2)}} + \dot{\tilde{\sigma}} - 2 \frac{D^{(1)}}{D^{(2)}} D^{(2)} = 0. \quad (1.69)$$

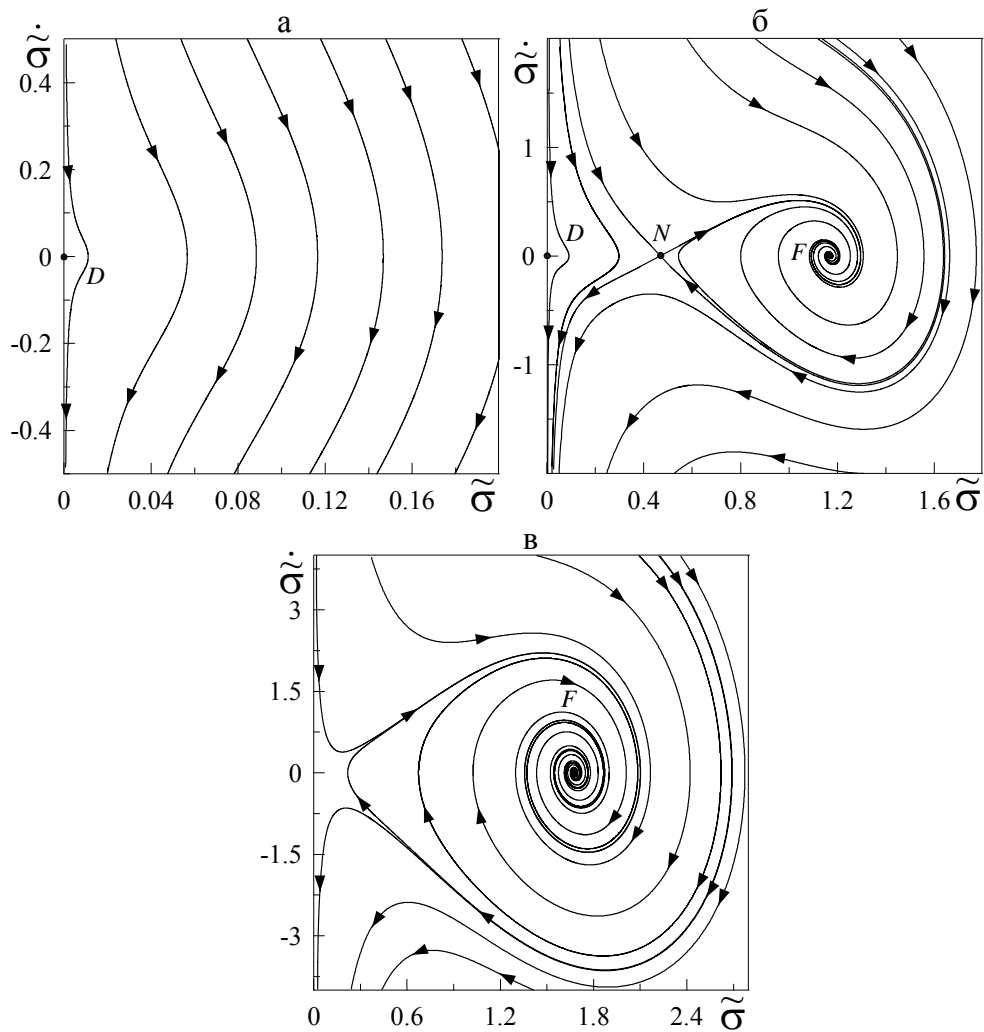


Рисунок 1.7— Фазові портрети системи, відповідні параметрам рис. 1.4: а – DF режим відповідає кривій 1 рис. 1.4; б – SS — кривій 2 рис. 1.4; в – SF — кривій 3 рис. 1.4.

Його дослідження, засноване на методі фазової площини $(\dot{\tilde{\sigma}}, \tilde{\sigma})$, викладено нижче. Розглянемо спочатку стаціонарні стани. Вважаючи в (1.69) $\dot{\tilde{\sigma}} = 0$, приходимо до рівняння (1.54).

Розглянемо кінетику поведінки системи, що слідує з фазових портретів, визначених рівнянням (1.69). На рис. 1.7 приведені фазові портрети, відповідні кривим рис. 1.4.

Область сухого тертя (DF) (рис. 1.7а) характеризується наявністю однієї особливої точки D , яка відповідає максимуму вірогідності $P(\sigma)$ при $\sigma = 0$. Ця точка є нестандартною і вимагає інтерпретації. Вона розташована на початку координат, і навколо неї згинаються фазові траєкторії таким чином, що система ніколи не приходять до значення $\sigma = 0$, тобто ця точка не є стаціонарною. Розглянемо поведінку системи за довільних початкових умов. Згідно фазовим траєкторіям система прагне до нульового значення напружень. Причому якщо в початкових умовах швидкість росту напружень позитивна, то вона спочатку спаде до нуля (за цей час значення напружень встигне вирости). А потім величина напружень асимптотично зменшуватиметься до нуля зі збільшенням швидкості їх убуття. Мабуть, описана ситуація відповідає режиму вибухової аморфізації, при

якому система дуже швидко переходить в аморфний твердоподібний стан. Той факт, що нульові напруження ніколи не досягаються, свідчить про розбіжність вірогідності $P(\sigma)$ у нульовій точці. Це пов'язано з нескінченним наростанням швидкості збування напружень при наближенні системи до $\sigma = 0$. Припустимо, що система підходить до точки, в якій швидкість зміни зменшення напружень стає критичною. У такому разі слідче чекати збільшення значення напружень, яке супроводитиметься зміною знаку швидкості і переходом системи в позитивну область фазової площини. Далі знову послідує зменшення значення напружень, і описана ситуація повториться. Або ж у такому разі може послідувати не зміна знаку швидкості, а лише її зменшення, що перекине систему на сусідню фазову траєкторію по якій вона ще швидше наблизатиметься до нульового значення напружень. В результаті за довільних початкових умов в системі з часом встановиться коливальний режим сухого тертя в околиці точки $\sigma = 0$. При цьому амплітуда коливань мала, і мастило має твердоподібну структуру.

Фазовий портрет системи, що характеризує область переривчастого тертя (SS) приведений на рис. 1.7б. Тут з'являються три особливі точки: D , сідло N і стійкий фокус F . Точка D , як і раніше реалізується на початку координат і відповідає режиму сухого тертя в системі. Сідло N відповідає мінімуму $P(\sigma)$, і тому є нестійкою стаціонарною точкою. Слід зазначити, що при початковому значенні зсувних напружень правіше точки N і нульовій швидкості їх зміни у системі з часом встановиться рідинний режим тертя. Якщо ж початкове значення напружень виявиться лівішим за сідло N , то у аналогічному випадку в системі встановиться сухе тертя. Таким чином, точка N розмежує два максимуми функції розподілу $P(\sigma)$. Фокус F відповідає ненульовому максимуму розподілу напружень, тобто описує рідиноподібний стан мастила. Відповідаючи цій точці затухаючі коливання означають, що мастило ставатиме то більш рідким, то більш в'язким. Проте, завжди з часом встановиться стійке рідинне тертя. Мабуть, дані коливання обумовлені наявністю шуму у системі.

На рис. 1.7в приведений фазовий портрет, що відповідає області рідинного тертя (SF), яка характеризується єдиним ненульовим максимумом функції розподілу $P(\sigma)$. Він характеризується однією особливою точкою — стійким фокусом F , який відповідає стійкому рідинному тертю. На це також указує велика розтягненість фазових траєкторій поблизу нього уздовж осей ординат і абсцис. Проте, видно, що при початковому великому значенні σ система не попадає в точку F , а асимптотика наближається до нульового значення напружень. Дана обставина говорить про те, що можуть реалізуватися умови при яких система наблизатиметься до режиму сухого тертя. Як описано раніше, досягши значення критичної швидкості її знак поміняється, і вона стане позитивною. З фазового портрета видно що у такому разі система перейде до режиму стійкого рідинного тертя.

1.4. Врахування деформаційного дефекту модуля зсуву

Як було показано раніше, рівняння (1.1) зводиться до співвідношення Максвелла, яке припускає використання моделі Генкі. Для залежності напружень від деформації $\sigma(\varepsilon)$ ця модель представляється законом Гука $\sigma = G\varepsilon$ при $\varepsilon < \varepsilon_m$ і константою $\sigma_m = G\varepsilon_m$ при $\varepsilon \geq \varepsilon_m$ (σ_m, ε_m — максимальні значення пружного зсувного напруження і деформації для гуківської ділянки $\sigma > \sigma_m$ приводить до в'язкої течії із швидкістю деформації $\dot{\varepsilon} = (\sigma - \sigma_m)/\eta$). Фактично крива залежності $\sigma(\varepsilon)$ володіє двома ділянками: перша, гуківська, має великий кут нахилу, визначуваний модулем зсуву G , за ним слідує набагато пологіша ділянка пластичної деформації, нахил якої визначається коефіцієнтом зміцнення $\Theta < G$. Очевидно, представлена картина означає, що модуль зсуву залежить від величини напруження. Використовуватимемо просте наближення

$$G(\sigma) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\sigma/\sigma_p)^\beta}, \quad \beta > 0, \quad (1.70)$$

що описує представлений вище перехід режиму пружної деформації у пластичний. Він відбувається при характерних значеннях зсувних напружень σ_p і деформації ε_p . Слід зазначити, що при описі структурних фазових переходів рідиноподібному мастилу характерна наявність інваріантів третього порядку, які порушують парність залежності синергетичного потенціалу V від напружень σ . Тому в наближенні (1.70) використовується лінійний член σ/σ_p ($\beta = 1$), замість квадратичного $(\sigma/\sigma_p)^2$ ($\beta = 2$) [13], і відповідна залежність $V(\sigma)$ вже не є парною [2]. Таким чином, непарні значення β відповідають експерименту, в якому ковзання блоку у взаємно протилежних напрямках не еквівалентні з енергетичної точки зору.

В результаті час релаксації τ_σ набуває залежності від величини напружень [2]

$$\frac{1}{\tau_\sigma(\sigma)} = \frac{1}{\tau_p} \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\sigma_p} \right). \quad (1.71)$$

Тут введений час релаксації на ділянці пластичної течії

$$\tau_p = \frac{\eta_\sigma}{\Theta}, \quad (1.72)$$

де $\eta_\sigma \equiv \tau_\sigma G$ — ефективна в'язкість Θ — коефіцієнт зміцнення $\theta = \Theta/G < 1$ — параметр, що визначає відношення кутів нахилу кривої деформації на пластичній і гуківській ділянках. При цьому рівняння (1.1) приймає вигляд:

$$\tau_p \dot{\sigma} = -\sigma \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\alpha} \right) + g_\Theta \varepsilon \quad (1.73)$$

де $g_\Theta \equiv G^2/\Theta G_0$ і $\alpha = \sigma_p/\sigma_s$ — позитивні постійні.

1.4.1. Динамічна фазова діаграма

При врахуванні деформаційного дефекту модуля зсуву слід аналізувати систему рівнянь (1.73), (1.2), (1.21). Тоді в рамках наближення (1.22) ця система, як і раніше, зводиться до рівняння

(1.27), де параметр m , коефіцієнт тертя γ , сила f і амплітуда шуму ϕ визначаються виразами

$$\begin{aligned} m &\equiv \frac{\tau_p \tau_\varepsilon}{g_\Theta}, \quad \gamma(\sigma) \equiv \frac{1}{g_\Theta} \left[\tau_\varepsilon \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{(1 + \sigma/\alpha)^2} \right) + \tau_p (1 + \sigma^2) \right], \\ f(\sigma) &\equiv \sigma \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \sigma^3 \left[\frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - 1 \right], \\ \phi(\sigma) &\equiv \sigma. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Згідно методу ефективного потенціалу ми отримуємо рівняння Фоккера-Планка (1.47) з відповідними коефіцієнтами $D^{(1)}$, (1.48) і $D^{(2)}$, (1.49), які при використанні (1.74) запишуться в явному вигляді

$$\begin{aligned} D^{(1)} &= \frac{1}{\gamma} \left\{ \sigma \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] + \sigma^3 \left[1 - \frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - I\sigma\tau_\lambda - \frac{2I\sigma}{\gamma^2} \left[\gamma - \frac{\sigma}{g_\Theta} \left(\frac{\tau_\varepsilon(1 - \theta^{-1})}{(1 + \sigma/\alpha)^3 \alpha} + \sigma\tau_p \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.75)$$

$$D^{(2)} = \frac{I\sigma^2}{\gamma} [\gamma^{-1} + 2\tau_\lambda]. \quad (1.76)$$

Стационарний стан зсувних напружень визначається умовою (1.54) яка з врахуванням (1.75), (1.76) набирає вигляду

$$\begin{aligned} &\left\{ T_e - 1 - \frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - \sigma^2 \left[\frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - 1 \right] - I\tau_\lambda \right\} \gamma^2 - \\ &- 2I\gamma + \frac{2I\sigma}{g_\Theta} \left[\tau_p \sigma - \tau_\varepsilon \frac{\theta^{-1} - 1}{\alpha(1 + \sigma/\alpha)^3} \right] = 0. \end{aligned} \quad (1.77)$$

Вважаючи в (1.77) $\sigma = 0$, знаходимо рівність, аналогічну по сенсу (1.56), яка дає межу існування максимуму розподілу (1.50) при нульовому значенні напружень відповідного твердоподібному стану мастила:

$$T_{e0} = \frac{\theta^{-1} + g_\Theta}{g_\Theta} + \left(\tau_\lambda + \frac{2g_\Theta}{\theta^{-1}\tau_\varepsilon + \tau_p} \right) I. \quad (1.78)$$

Залежності $P(\sigma)$ для різних режимів тертя показані на рис. 1.8. Криві 1 — 5 відповідають областям сухого (DF), переривчастого (SS), переривчастого і рідинного (SS+SF), рідинного метастабільного і стійкого (MSF+SF), рідинного тертя (SF). Режими тертя, показані на фазовій діаграмі (рис. 1.9), відповідають кривим рис. 1.8. Найскладніша форма функції $P(\sigma)$ спостерігається в області SS+SF (крива 3 на рис. 1.8). Тут співіснують твердоподібне, а також метастабільне і стійке рідиноподібні стани мастила які відповідають максимумам $P(\sigma)$. Це має на увазі можливість реалізації переривчастого (stick-slip) тертя при якому відбуваються періодичні переходи між динамічними режимами, які відповідають вказаним станам. Слід зазначити, що дана область, на відміну від інших, при зміні параметрів системи може не реалізуватися.

В області MSF+SF режими метастабільного і стійкого рідинного тертя можуть періодично змінювати один одного, забезпечуючи переривисте тертя (крива 4 на рис. 1.8). Відзначимо, що перехід від SS+SF режиму до MSF+SF супроводжується зникненням сухого тертя в системі.

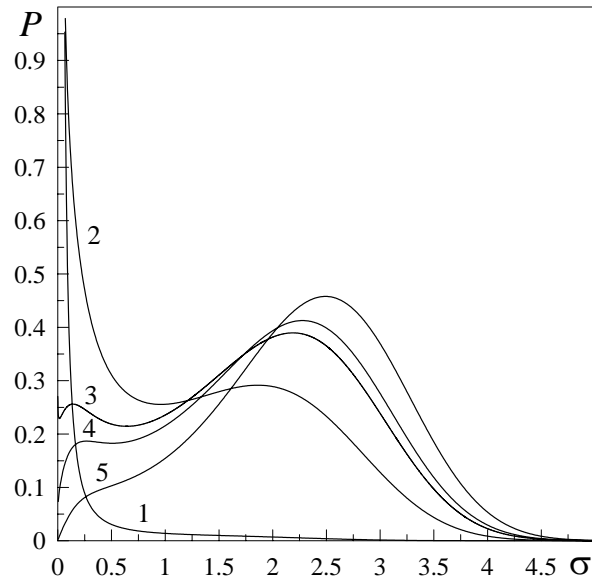


Рисунок 1.8— Функція розподілу зсувних напружень (1.50) для фазового переходу першого роду при $\tau_p = \tau_\varepsilon = \tau_\lambda = 0.1$, $\theta^{-1} = 7$, $\alpha = 0.3$, $g_\Theta = 0.4$, $I = 4.5$. Криві 1 – 5 відповідають температурам $T_e = 16, 21, 23.25, 24, 26$.

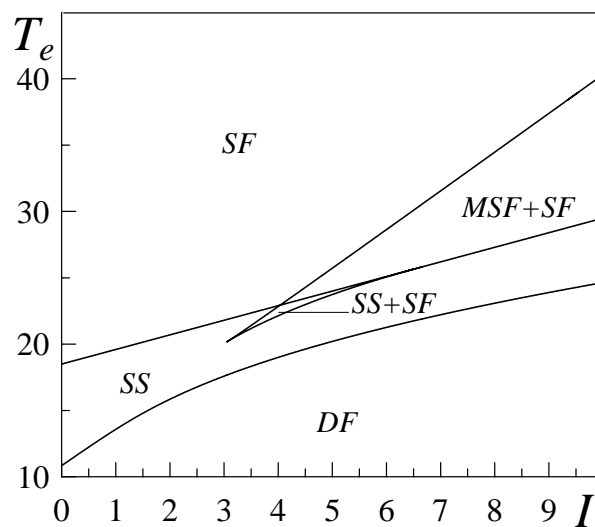


Рисунок 1.9— Фазова діаграма з областями рідинного (SF), сухого (DF) і переривчастих (SS, MSF+SF, SS+SF) режимів тертя, відповідаюча параметрам рис. 1.8.

1.4.2. Фазова кінетика

Для дослідження кінетики системи скористаємося раніше викладеним методом. При врахуванні деформаційного дефекту модуля зсуву всі співвідношення даного розділу залишаються колишніми, тільки коефіцієнти $D^{(1)}$ і $D^{(2)}$ даються виразами (1.75), (1.76). Згідно цьому досліджуємо кінетичне рівняння (1.69) з коефіцієнтами (1.75), (1.76).

В даному випадку спостерігаються складніший вид розподілу вірогідності і, як наслідок, складніші фазові портрети. На рис. 1.10 приведені фазові портрети, відповідаючі кривим рис. 1.8.

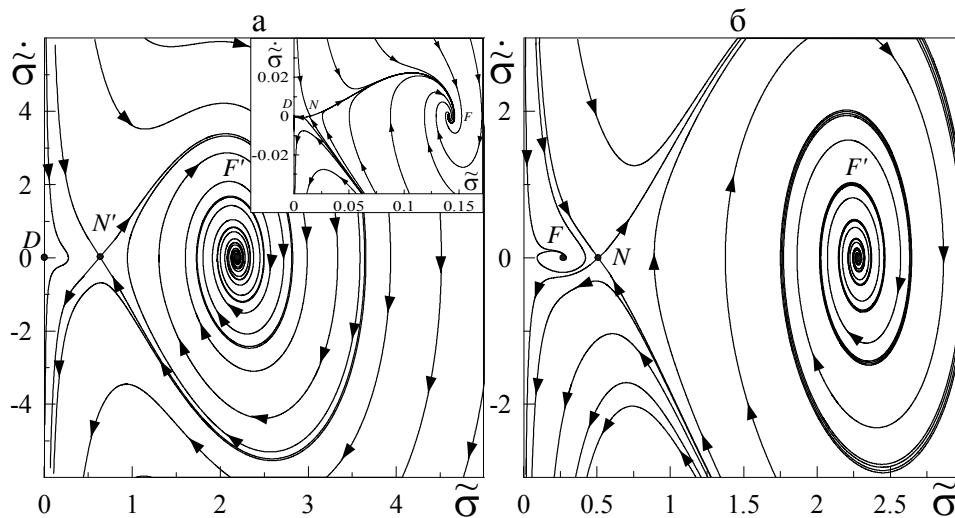


Рисунок 1.10— Фазові портрети системи, відповідаючі параметрам рис. 1.8: а — SS+SF — відповідає кривій 3 рис. 1.8; б — MSF+SF — кривій 4 рис. 1.8.

Фазовий портрет області сухого тертя (DF) подібний до відповідного при безперервному перетворенні (рис. 1.7а). Це означає що області DF при врахуванні дефекту модуля і без нього еквівалентні.

Фазовий портрет, що описує область переривчастого тертя (SS) також аналогічний характерному для області SS при безперервному перетворенні (рис. 1.7б). Основна їх відмінність полягає в тому, що тут траєкторії навколо фокусу значно більш витягнуті уздовж обох осей, що говорить про більшу стійкість режиму рідинного тертя в системі.

Найскладніша область (SS+SF) представлена фазовим портретом, показаним на рис. 1.10а. Тут реалізуються п'ять особливих точок: D , сідла N , N' , стійкі фокуси F , F' . Як і раніше, сідла відповідають мінімумам залежності $P(\sigma)$. Точка D відповідає твердоподібній поведінці мастила. Стійкий фокус F визначає перший ненульовий максимум вірогідності. Видно, що навколо цієї точки коливання слабо виражені. Видно, в даному режимі мастило є дуже в'язкою рідиною оскільки в такого роду рідині за наявності шуму коливання сильно демпфуються. Дійсно, точка F відповідає малим значенням напружень а чим вони менші, тим мастило стає більш в'язким, і при $\sigma = 0$ воно переходить в твердоподібний стан. Фокус F' відповідає другому ненульовому максимуму функції $P(\sigma)$, навколо його вже існують коливання з великою амплітудою. Дана поведінка відповідає текучому стану мастила, і відповідно, ковзанню. Точка F' відокремлена від всіх останніх на більшій відстані по осі абсцис. Даний режим тертя лише найбільш вірогідний в системі, оскільки крапки D і F , що відповідають сухому і метастабільному рідинному тертю, також володіють великою стійкістю і вірогідністю реалізації. Звідси слідує висновок, що система може зазнавати періодичні переходи (stick-slip) між режимами, відповідаючими точкам D , F і F' . Оскільки ці режими самі по собі стійкі і розділені вираженими мінімумами функції розподілу $P(\sigma)$ (сідлами), то переходи між ними слід

чекати через великі проміжки часу.

Фазовий портрет області MSF+SF представлений на рис. 1.10б. На ньому присутні три особливі точки — стійкі фокуси F , F' і сідло N . Останнє аналогічно раніше описаним сідлам і відповідає мінімуму залежності вірогідності від напружень. Точка F відповідає першому максимуму розподілу, який описує метастабільний рідинний режим (MSF), а F' — другому максимуму, який відповідає стійкому рідинному тертю (SF). Як видно, навколо фокусу F існують лише незначні коливання, проте мастило в цьому режимі є менш в'язкою рідиною, чим в околиці точки F на рис. 1.10а. На початку координат особлива точка відсутня, і сухий режим тертя не реалізується. Фокус F' аналогічний описаному на рис. 1.10а, проте його область "притягнення" більш розтягнута уздовж обох осей, що говорить про більшу текучість мастила і стійкість даного режиму. Тому в порівнянні з попереднім випадком тут вірогідніше виникнення режиму рідинного тертя (SF).

Вид фазового портрета для області SF аналогічний рисунку 1.7в, тому тут не приводиться. На ньому реалізується один стійкий фокус F , що представляє стійке рідинне тертя (SF), що характеризується коливаннями в його околиці. Основна відмінність полягає в тому, що в цьому випадку коливання відбуваються з великою амплітудою, що говорить про виражену стійкість такого режиму. Проте, як і у всіх раніше розглянутих ситуаціях, з часом в мастилi встановиться стаціонарне значення напружень, що відповідає максимуму початкового розподілу $P(\sigma)$.

1.5. Самоподібна поведінка

1.5.1. Безперервне перетворення

Для опису самоподібної поведінки досліджуваної системи у випадку впливу корельованих флуктуацій температури, замінемо у всіх початкових рівняннях (1.1), (1.2), (1.21) параметр порядку σ степеневим виразом σ^a з дробовим показником $0 < a < 1$. При цьому дана система набере вигляду:

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma^a + g\varepsilon \quad (1.79)$$

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)\sigma^a, \quad (1.80)$$

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma^a \varepsilon + \sigma^{2a} + \lambda(t). \quad (1.81)$$

За допомогою врахування білого шуму було показано що така система описує визначуваний одно-рідною функцією розподілу

$$P(\sigma) = y^{-2a} \mathcal{P}(\sigma) \quad y = \sigma \sigma_s \quad (1.82)$$

самоподібний режим, в якому відсутній характерний масштаб напружень [14].

Для дослідження цієї системи необхідно, як і раніше, звести її до одного рівняння. В рамках адіабатичного наближення (1.22) з рівняння (1.81) отримаємо вираз для температури

$$T = T_e - \sigma^a \varepsilon + \sigma^{2a} + \lambda(t). \quad (1.83)$$

Після комбінування рівностей (1.79), (1.80), (1.83) знаходимо шукане еволюційне рівняння, співпадаюче формою з (1.27), з коефіцієнтами:

$$\begin{aligned} \gamma(\sigma) &\equiv \frac{1}{g} [\tau_\varepsilon \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})], & f(\sigma) &\equiv \sigma^a (T_e - 1 - g^{-1}) - \sigma^{3a} (g^{-1} - 1), \\ \phi(\sigma) &\equiv \sigma^a, & m &\equiv \frac{\tau_\sigma \tau_\varepsilon}{g}. \end{aligned} \quad (1.84)$$

Діючи в рамках методу ефективного потенціалу, отримаємо рівняння Фоккера-Планка (1.47) з коефіцієнтами $D^{(1)}$, (1.48) і $D^{(2)}$, (1.49), які при використанні (1.84) запишуться у вигляді

$$\begin{aligned} D^{(1)} &= \frac{g}{\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})} \left\{ \sigma^{3a} \left[I g a \left(\frac{2\tau_\sigma \sigma^{a-1} + \tau_\varepsilon (a-1)\sigma^{-2}}{[\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})]^2} \right) + \frac{g-1}{g} \right] + \right. \\ &+ \left. \sigma^a \left[T_e - \frac{1+g}{g} - I a \sigma^{a-1} \left(\frac{2g}{\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})} + \tau_\lambda \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.85)$$

$$D^{(2)} = \frac{I g \sigma^{2a}}{\tau_\varepsilon \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})} \left[\frac{g}{\tau_\varepsilon \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})} + 2\tau_\lambda \right]. \quad (1.86)$$

Стационарний розподіл (1.50), показаний на рис. 1.11, володіє максимумами, положення яких визначаються набором величин T_e , g , I , a , τ_λ , τ_ε і τ_σ .

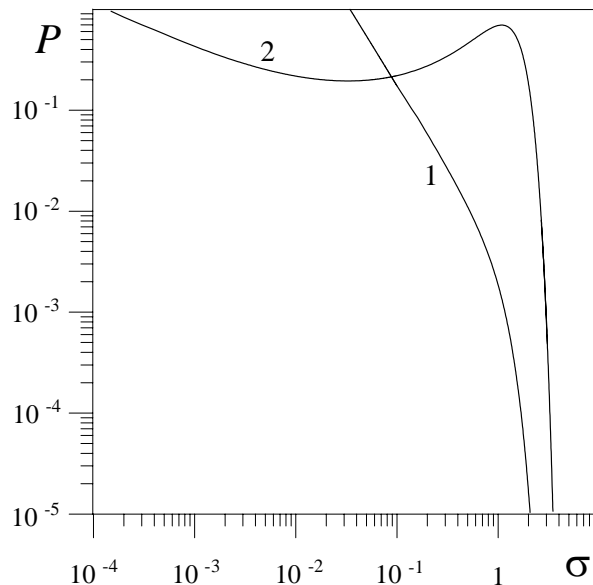


Рисунок 1.11— Функція розподілу зсувних напружень (1.50) для переходу другого роду при $g = 0.2$, $\tau_\sigma = \tau_\varepsilon = \tau_\lambda = 0.1$, $a = 0.75$ і $I = 2$. Криві 1, 2 відповідають температурам $T_e = 6, 12$ відповідно.

При малих значеннях температури поверхонь T_e реалізується єдиний максимум в точці $\sigma_0 = 0$, відповідаючий твердоподібному стану мастила і режиму сухого тертя (крива 1). Із зростанням T_e з'являється максимум в точці $\sigma_0 \neq 0$, що відповідає стаціонарному стану, в якому відбувається спонтанна поява зсувних напружень, що приводить до плавлення мастил, переходу до режиму

рідинного тертя і, як наслідок, ковзання. Як показано кривою 2 на рис. 1.11, з подальшим збільшенням T_e два вказані максимуми співіснують, і реалізується режим переривчастого тертя. Зникнення нульового максимуму $\sigma_0 = 0$ відбувається тільки у разі відсутності в системі шуму ($I = 0$) при перевищенні критичного значення температури T_e (1.88). Як видно з рис. 1.11, розподіл (1.50) набирає степеневого вигляду (1.82) в області $\sigma \ll 1$ навіть при низьких температурах T_e , що відповідають сухому тертю. Це означає, що кореляції флуктуацій призводять до виникнення самоподібного режиму поведінки твердоподібного мастила.

Стационарний стан зсувних напружень, що визначається умовою екстремуму розподілу $P(\sigma)$ (1.54), при підстановці виразів (1.85), (1.86), набуде форми

$$\left\{ T_e - \frac{1+g}{g} - \sigma^{2a} \left(\frac{1-g}{g} \right) - I\tau_\lambda a \sigma^{a-1} \right\} [\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})]^2 - Iga \sigma^{a-1} [\tau_\varepsilon \sigma^{a-1} (a+1) + 2\tau_\sigma] = 0. \quad (1.87)$$

Його розв'язок показаний на рис. 1.12, згідно з яким зростання інтенсивності шуму I призводить до появи на монотонній залежності $\sigma_0(T_e)$ двозначної ділянки, властивій переходам першого роду.

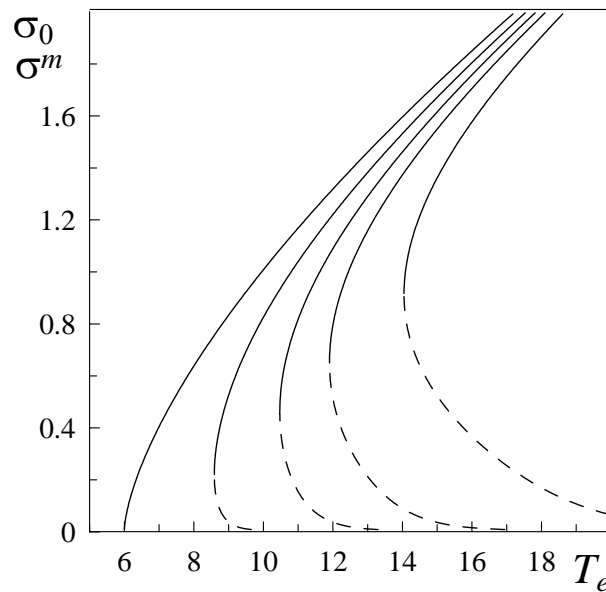


Рисунок 1.12— Залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 , σ^m від температури T_e при параметрах рис. 1.11 і $I = 0, 1, 2, 3, 5$ (відповідні криві розташовані зліва направо).

При $a \neq 1$ в (1.87) можна покласти $\sigma = 0$ тільки у разі відсутності шуму ($I = 0$). Отже, граничне значення температури зсувних поверхонь

$$T_{c0} = 1 + g^{-1} \quad (1.88)$$

що забезпечує перехід системи до рідинного тертя, відповідає точці А на фазовій діаграмі (рис. 1.13). Тут режиму рідинного тертя (SF) відповідають лише ділянка осі ординат вище А, і

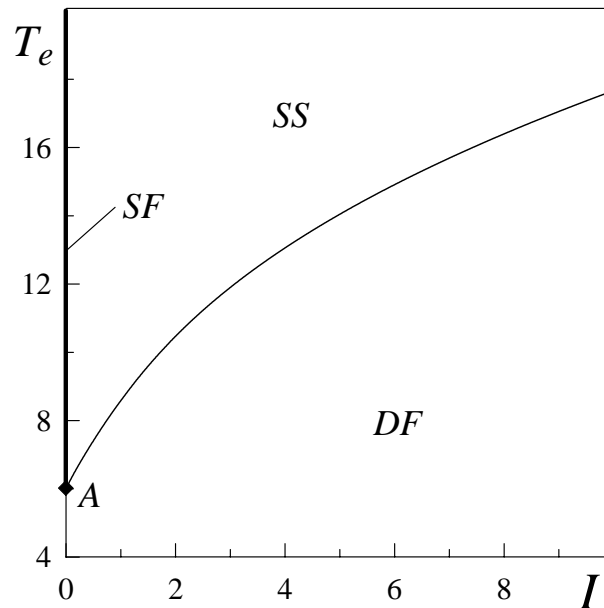


Рисунок 1.13— Фазова діаграма, відповідаюча параметрам рис. 1.11 з областями рідинного (SF) (на осі ординат вище за трикритичну точку A) сухого (DF) і переривчастого (SS) тертя.

основний простір займають області сухого (DF) і переривчастого (SS) тертя. Зростання часу кореляції τ_λ призводить до розширення області сухого тертя, а переривчасте тертя стає при цьому таким, що все більш важко реалізується. Очевидно, що на характер ділянки рідинного тертя тривалість часу кореляції не впливає. Критичні значення параметрів стану визначаються умовою $\left| \frac{d\sigma}{dT_e} \right| = \infty$, що приводить до рівняння:

$$\begin{aligned} & \left\{ 2a \frac{g-1}{g} \sigma^{a-1} - I \tau_\lambda (a-1) \sigma^{a-2} \right\} [\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})]^2 + \\ & + 2a \left\{ T_e - \frac{1+g}{g} - \sigma^{2a} \frac{1-g}{g} - I \tau_\lambda a \sigma^{a-1} \right\} [\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})] \times \\ & \times [\tau_\varepsilon (a-1) \sigma^{a-2} + 2\tau_\sigma \sigma^{2a-1}] - \\ & - 2Iga \sigma^{a-2} (a-1) [\tau_\sigma + \tau_\varepsilon (a+1) \sigma^{a-1}] = 0. \end{aligned} \quad (1.89)$$

Аналіз приведених рівнянь показує, що при переході від рівності $a = 1$ до випадку $0 < a < 1$ істотна зміна спостерігається для залежності стаціонарної зсувних напружень σ_0 від температури T_e . Як видно з рис. 1.14, мінімум функції розподілу (1.50), положення якого визначається напруженнями $\sigma = \sigma^m$ (штрихова крива), може реалізуватися при $\sigma^m = 0$, тільки коли $a = 1$.

У решті випадків вказана крива асимптотично наближається до $\sigma^m = 0$ із зростанням параметра T_e . Це говорить про те, що при довільному значенні температури зсувних поверхонь існує максимум функції розподілу (1.50) що відповідає нульовому значенню напружень $\sigma_0 = 0$, тобто сухому тертю. Таким чином, чисто рідинний режим тертя в системі при $a \neq 1$ і $I \neq 0$ не реалізується.

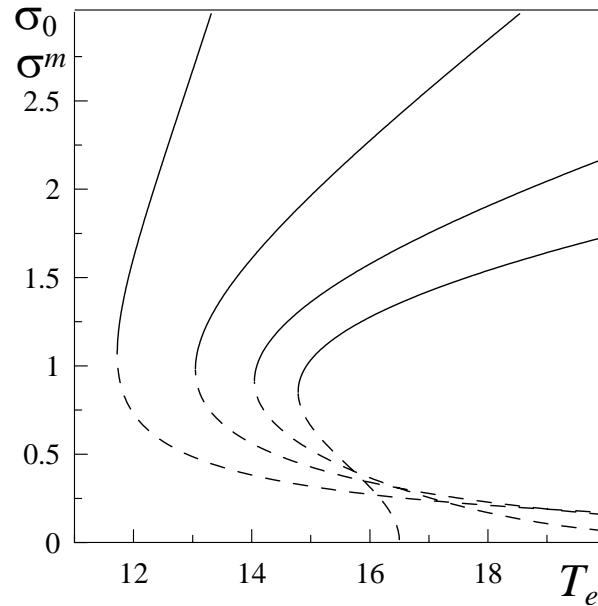


Рисунок 1.14— Залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 , σ^m від температури T_e при параметрах рис. 1.11, $I = 5$ і $a=0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ (відповідні криві розташовані зліва направо).

1.5.2. Врахування деформаційного дефекту модуля зсуву

Для врахування деформаційного дефекту модуля зсуву рівняння (1.79) замінимо на

$$\tau_p \dot{\sigma} = -\sigma^a \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\alpha} \right) + g_{\Theta} \varepsilon. \quad (1.90)$$

Як і в попередньому підрозділі, зведемо систему (1.90), (1.80), (1.81) до єдиного рівняння для параметра порядку (1.27) з коефіцієнтами

$$\begin{aligned} \gamma(\sigma) &\equiv \frac{1}{g_{\Theta}} \left[\tau_{\varepsilon} \left(a\sigma^{a-1} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) + \sigma^a \frac{1 - \theta^{-1}}{\alpha(1 + \sigma/\alpha)^2} \right) + \tau_p(1 + \sigma^{2a}) \right], \\ f(\sigma) &\equiv \sigma^a \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \sigma^{3a} \left[\frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - 1 \right], \\ \phi(\sigma) &\equiv \sigma^a, \quad m \equiv \frac{\tau_p \tau_{\varepsilon}}{g_{\Theta}}. \end{aligned} \quad (1.91)$$

Згідно методу ефективного потенціалу отримаємо рівняння Фоккера-Планка (1.47) з коефіцієнтами дрейфу $D^{(1)}$ і дифузії $D^{(2)}$:

$$\begin{aligned} D^{(1)} &= \frac{1}{\gamma} \left\{ \sigma^a \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] + \sigma^{3a} \left[1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \right. \\ &\quad - I\sigma^{2a-1} a\tau_{\lambda} - \frac{2I\sigma^a}{\gamma^2} \left[\gamma\sigma^{a-1} a - \frac{\sigma^a \tau_{\varepsilon}}{g_{\Theta}} \left(\frac{\sigma^{2a-1} a\tau_p}{\tau_{\varepsilon}} + \frac{\sigma^{a-2}(a-1)(\sigma + \theta^{-1}\alpha)}{2\alpha(1 + \sigma/\alpha)} \right) + \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\sigma^{a-1}(1 - \theta^{-1})}{\alpha(1 + \sigma/\alpha)^2} + \frac{\sigma^a(\theta^{-1} - 1)}{\alpha^2(1 + \sigma/\alpha)^3} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.92)$$

$$D^{(2)} = \frac{I\sigma^{2a}}{\gamma} [\gamma^{-1} + 2\tau_{\lambda}]. \quad (1.93)$$

Стаціонарний стан зсувних напружень визначається умовою (1.54), яка з урахуванням виразів (1.92) та (1.93) набирає вигляду:

$$\left\{ T_e - 1 - \frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) + \sigma^{2a} \left[1 - \frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - I \sigma^{a-1} a \tau_\lambda \right\} \gamma^2 - 2I \sigma^{a-1} \gamma + \frac{2I \sigma^a \tau_\varepsilon}{g_\Theta} \left[\frac{\sigma^{2a-1} a \tau_p}{\tau_\varepsilon} + \frac{\sigma^{a-2} (a-1) (\sigma + \theta^{-1} \alpha) + \sigma^{a-1}}{2\alpha(1 + \sigma/\alpha)} + \frac{\sigma^{a-1} (1 - 2\theta^{-1} - \sigma/\alpha)}{2\alpha(1 + \sigma/\alpha)^2} + \frac{\sigma^a (\theta^{-1} - 1)}{\alpha^2 (1 + \sigma/\alpha)^3} \right] = 0. \quad (1.94)$$

Вважаючи в (1.94) $\sigma = 0$, знайдемо межу існування нульового максимуму розподілу (1.50) відповідаючого твердоподібному стану мастила. Як і для переходу другого роду, маємо точку (1.88), яку можна отримати тільки у випадку $I = 0$, або при $a = 1$. Залежність стаціонарних значень зсувних напружень $\sigma_0 \sigma^m$ від температури поверхонь тертя T_e є розв'язком рівняння (1.94) і показана на рис. 1.15.

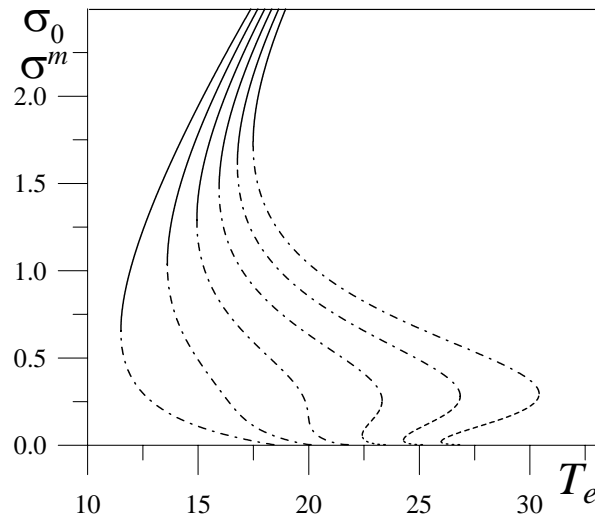


Рисунок 1.15— Залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0, σ^m від температури T_e для переходу першого роду при $\tau_p = \tau_\varepsilon = \tau_\lambda = 0.1$, $\theta^{-1} = 7$, $\alpha = 0.3$, $g_\Theta = 0.4$, $a = 0.75$ і $I=0, 1, 2, 3, 4, 5$ (відповідні криві розташовані зліва направо).

З рисунка видно, що зростання інтенсивності шуму I приводить до появи двох стаціонарних станів, які відповідають максимумам функції розподілу $P(\sigma)$ (1.50) при ненульовому напруженні (рис. 1.16). Звідси можна укласти, що існують два значення напружень σ_0 , при яких плавиться мастило [2], що визначаються величинами $T_e, g_\Theta, I, \theta, \alpha, \tau_\lambda, \tau_p$ і τ_ε . Менше з цих значень відповідає метастабільному рідиноподібному стану мастила (штрихова крива на рис. 1.15), більше (суцільна) — її стійкому рідиноподібному стану. Їх розділяє нестійкий стан (штрихпунктирна крива) при значенні напружень σ^m , яке відповідає мінімуму вірогідності (1.50). З рис. 1.16 видно, що розподіл (1.50) має максимум в точці $\sigma_0 = 0$, що відповідає твердоподібному стану мастила або сухому тертю [2, 15], при довільних T_e . Крім того, як і у разі переходу другого роду, в області $\sigma \ll 1$ завжди спостерігається лінійна ділянка розподілу.

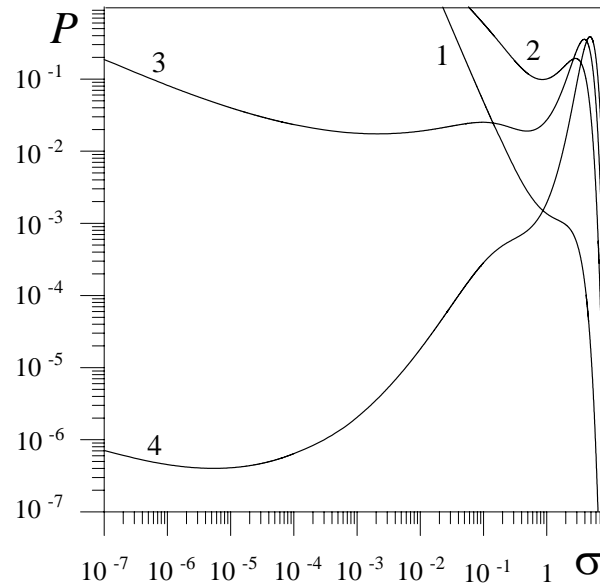


Рисунок 1.16— Функція розподілу зсувних напружень, відповідаюча параметрам рис. 1.15 і $I = 4$. Криві 1 – 4 відповідають температурам $T_e = 15, 20, 25, 30$.

Фазова діаграма, характерна для даної системи, представлена на рис. 1.17. Тут область су-

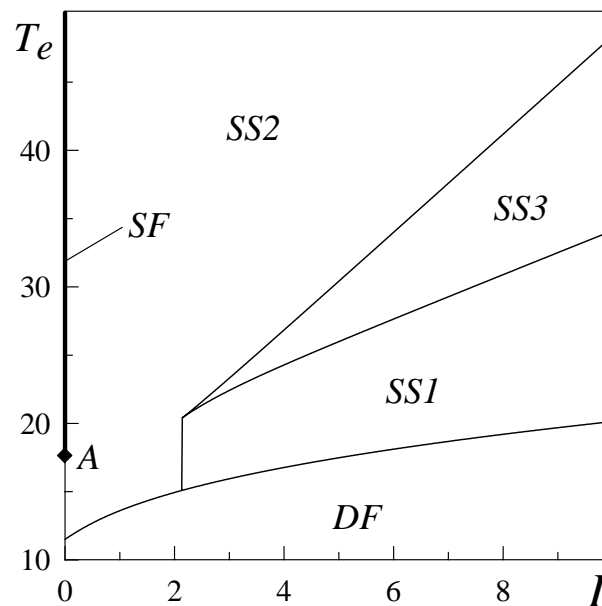


Рисунок 1.17— Фазовая діаграма з областями рідинного (SF), сухого (DF) і переривчастих (SS1,SS2,SS3) режимів тертя, відповідаюча параметрам рис. 1.15.

хого тертя DF відповідає існуванню єдиного максимуму вірогідності $P(\sigma)$ при $\sigma_0 = 0$ (крива 1 на рис. 1.16). В області переривчастого тертя (SS1) співіснують твердоподібна і рідиноподібна фази мастила. Тобто окрім нульового на залежності $P(\sigma)$ з'являється максимум при $\sigma_0 \neq 0$, який відповідає плавленню мастила або рідинному тертю (крива 2 на рис. 1.16). Область SS2 характеризується подібним виглядом функції $P(\sigma)$ (див. криву 4). Таким чином, область SS2 аналогічна по

фазовому складу SS1, з тією лише різницею, що для неї характерні відмінні значення стаціонарного напруження $\sigma_0 \neq \sigma^m$ і вірогідності реалізації сухого і рідинного тертя. Область SS3 характеризується найскладнішим видом функції $P(\sigma)$ (крива 3 на рис. 1.16). Тут співіснують твердоподібне і два рідіноподібних стани мастила, причому останні відповідають максимумам $P(\sigma)$, що має різний вигляд. Це означає можливість реалізації переривчастого (stick-slip) руху, при якому відбуваються періодичні переходи між динамічними режимами тертя, відповідаючими трьом вказаним станам, з різною вірогідністю. Як і у разі фазового переходу другого роду стійкому рідинному тертю (SF) відповідає ділянка осі ординат вище за точку A , координата T_{c0} якої визначається виразом (1.88), де g замінено на g_Θ . Відзначимо ще раз, що цей режим тертя можливий, коли $I = 0$ або $a = 1$. У останньому випадку представлена картина змінюється істотним чином і умова (1.88) трансформується з точки в пряму лінію. Із зростанням часу кореляції шуму τ_λ область сухого тертя (DF) розширюється, а області переривчастого тертя (SS1, SS2, SS3) зменшуються, на режим рідинного тертя (SF) тривалість τ_λ не робить впливу.

Аналіз приведених рівнянь показує, що при переході від випадку $a = 1$ до $0 < a < 1$ найбільш істотна зміна спостерігається для залежності стаціонарних зсувних напружень σ_0, σ^m від температури T_e . Згідно (1.94) в детерміністичній ситуації ($I = 0$) може виконуватися рівність $\sigma_0 = 0$ і $\sigma^m = 0$ (див. рис. 1.18а). З рис. 1.18б видно, що при інтенсивності шуму $I \neq 0$ мінімум функції розподілу

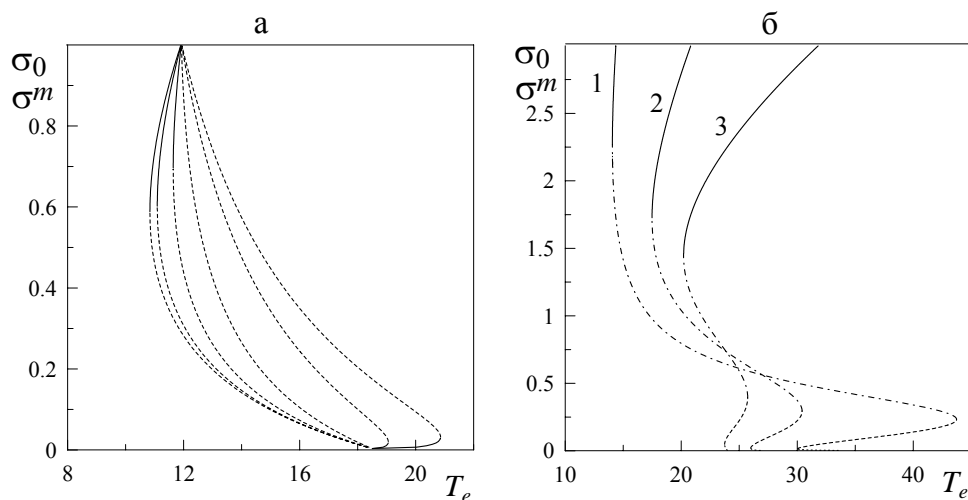


Рисунок 1.18— Залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0, σ^m від температури T_e при параметрах рис. 1.15: а — $I = 0$ і $a=0.2, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 1.0$ (відповідні криві розташовані справа наліво); б — $I = 5$ і $a=0.5, 0.75, 1.0$ (криві 1,2,3 відповідно).

$P(\sigma)$ (1.50) може реалізуватися при $\sigma^m = 0$ тільки коли $a = 1$. Таким чином, чисто рідинний режим тертя (SF) в системі при $a \neq 1$ і $I \neq 0$ не існує. Слід зазначити, що вираз (1.94) має досить складну структуру. Зокрема як видно з рис. 1.18а, із зростанням величини a максимум функції $T_e(\sigma)$ трансформується в її мінімум, що означає зміну характеру тертя.

У згоді з вказаним вище, вид фазової діаграми істотно залежить від величини a . З її зменшенням від одиниці до значення $a \approx 0.25$ число областей на діаграмі збільшується, а далі — змен-

шується. Найскладнішу структуру має фазова діаграма показана на рис. 1.19а. Вона прогнозує 15

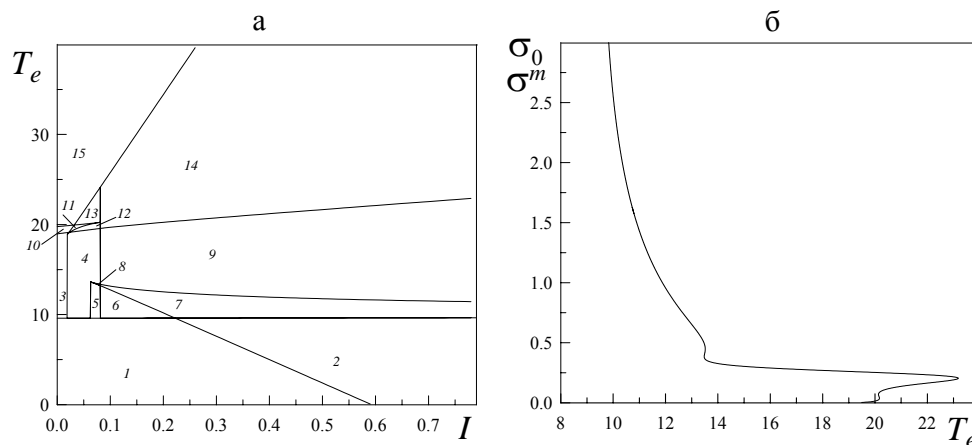


Рисунок 1.19— а — фазова діаграма при параметрах рис. 1.15 і $a = 0.25$; б — залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0, σ^m від температури T_e , відповідаюча рисунку 1.19а при $I = 0.07$.

різних режимів тертя при ненульових інтенсивностях шуму I , причому більшість з них відповідають малим I і вузькому їх діапазону. Мабуть, такий вид фазової діаграми відповідає режиму перемешаїмості, що властивий явищу СОК. На рис. 1.19б приведена відповідна залежність стаціонарних значень зсувних напружень від температури T_e . Видно, що вона має безліч максимумів і мінімумів, які визначають межі областей на фазовій діаграмі.

Дослідження рівнянь (1.79) — (1.81) методом фазової площини показує, що фазові портрети для аналогічних областей по своєму вигляду повторюють вже розглянуті раніше. При цьому спостерігається одна істотна відмінність. Дробова система Лоренца приводить до того що при будь-яких параметрах системи при $a \neq 1$ і $I \neq 0$ на фазових портретах реалізується точка D , яка відповідає твердоподобному стану мастила. Крім того, варіація a приводить до ускладнення залежності $P(\sigma)$, і, як наслідок, до складнішого виду фазових портретів. В межах же одного режиму тертя при зменшенні a спостерігається збільшення абсцис стійких фокусів. Отже нелінійна релаксація напружень і дробові зворотні зв'язки в моделі Лоренца приводять до збільшення текучості мастила і зменшення тертя. Проте, за наявності дробового показника a у системі завжди реалізується сухе тертя. Таким чином, не можна однозначно стверджувати, що системи, що описуються за допомогою дробового показника переважніші для зменшення тертя, чим лінійні системи.

РОЗДІЛ 2

ГІСТЕРЕЗИСНІ ЯВИЩА ПРИ ПЛАВЛЕННІ УЛЬТРАТОНКОЇ ПЛІВКИ МАСТИЛА

2.1. Основні рівняння

Продовжимо дослідження системи рівнянь

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma + g\varepsilon, \quad (2.1)$$

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)\sigma, \quad (2.2)$$

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma\varepsilon + \sigma^2, \quad (2.3)$$

де введено константу $g = G/G_0 < 1$. Ці рівняння формально співпадають із синергетичною системою Лоренца [3], у якій зсувні напруження грають роль параметра порядку, спряжене поле зводиться до зсувної деформації, а температура представляє керуючий параметр. Відомо, що ця система використовується для опису як фазових термодинамічних [16], так і кінетичних [13] перетворень.

У роботі [2] плавлення ультратонкої плівки мастила в процесі тертя між атомарно-гладкими поверхнями слюди представлено як результат спонтанної появи зсувних напружень, викликаной нагрівом поверхонь тертя вище критичного значення $T_{c0} = 1 + g^{-1}$. Початковою причиною процесу самоорганізації є додатній зворотний зв'язок T і σ з ε , обумовлений температурною залежністю зсувної в'язкості, що приводить до її розбіжності. З іншого боку, від'ємний зворотний зв'язок σ і ε з T у (2.3) грає важливу роль, оскільки забезпечує стійкість системи.

Згідно з таким підходом мастило представляє дуже в'язку рідину, яка поводить себе подібно до аморфного твердого тіла — має велику ефективну в'язкість і все ще характеризується межею текучості [17, 18]. Її твердоподібний стан відповідає зсувним напруженням $\sigma = 0$, оскільки при цьому рівняння (2.1) випадає з розгляду ($\dot{\sigma} = 0$). Рівняння (2.2), що містить в'язкі напруження, зводиться до закону Дебая, що представляє швидку релаксацію зсувної деформації протягом мікроскопічного часу $\tau_\varepsilon \approx a/c \sim 10^{-12}$ с, де $a \sim 1$ нм — стала кристалічної решітки або міжмолекулярна відстань і $c \sim 10^3$ м/с — швидкість звуку. При цьому рівняння теплопровідності (2.3) набуває вигляду простого виразу для релаксації температури до значення T_e , і з нього зникають доданки, що відповідають за дисипативний розігрів і механокалоричний ефект в'язкої рідини.

При ненульових значеннях напружень σ рівняння (2.1) — (2.3) описують вказані вище властивості, притаманні рідиноподібному стану мастила. Така поведінка сильно відрізняється від об'

ємних змащувальних матеріалів і вимагає детального пояснення. Згідно з рівнянням (2.2), поява в'язких напружень σ_v приводить до пластичної течії рідиноподібного мастила з швидкістю $V = h\partial\varepsilon/\partial t$ (h – товщина плівки). Зокрема, в експериментах із апаратом поверхневих сил [19, 20] у рівняннях (2.1) – (2.3) ефективна амплітуда деформації $\varepsilon = x_{max}/h$ визначається як відношення амплітуди деформації (відхилення) x_{max} до h . Ефективна швидкість зсуву $\dot{\varepsilon} = \varepsilon\omega = V/h = \varepsilon/\tau_\sigma$ представляє добуток деформації ε і частоти коливань ω .

У роботі [21] показано, що пластична течія шару мастила реалізується за наявності у ньому пружних напружень. При цьому дія зсувних напружень приводить до зменшення модуля зсуву змащувального матеріалу [22]. Згідно з роботою [23], під час граничного режиму тертя із збільшенням в'язких напружень

$$\sigma_v = \frac{F_v}{A} \quad (2.4)$$

зростає в'язка сила тертя:

$$F_v = \frac{\eta_{eff}VA}{h}, \quad (2.5)$$

де η_{eff} – ефективна в'язкість, яка не співпадає з дійсною в'язкістю і знаходиться тільки експериментально [23], A – площа контакту. Комбінування рівностей (2.4) і (2.5) дає вираз для швидкості через напруження:

$$V = \frac{\sigma_v h}{\eta_{eff}}. \quad (2.6)$$

Таким чином, із зростанням зсувних напружень повна сила тертя зменшується, оскільки збільшується відносна швидкість руху контактуючих поверхонь – мастило плавиться.

Більше того, відповідно до [24] за відсутності деформації зсуву теплове середньоквадратичне відхилення молекул (атомів) визначається рівністю $\langle u^2 \rangle = T/Ga$. Середнє значення зсуву за рахунок зрушення знаходиться із співвідношення $\langle u^2 \rangle = \sigma^2 a^2 / G^2$. Повний середньоквадратичний зсув представляє суму цих виразів за умови, що теплові флуктуації і напруження незалежні. Це означає, що плавлення мастила викликається як нагріванням, так і впливом напружень, що створюються твердими поверхнями при терті. Останнє узгоджується з розглядом нестійкості твердоподібного стану в рамках уявлень про зсувне динамічне плавлення за відсутності теплових флуктуацій. Таким чином, флуктуації деформації, пов'язані з напруженнями, і теплові флуктуації слід розглядати незалежно. Надалі будемо припускати, що плівка мастила стає більш рідиноподібною, і сила тертя зменшується із зростанням температури за рахунок зменшення енергії активації стрибків молекул.

2.2. Гістерезисні явища при фазовому переході другого роду

2.2.1. Стрибкоподібне плавлення

Припустимо, що в рівнянні (2.1) параметр $g \equiv G/G_0$ замінюється на залежність $g \equiv G(\sigma)/G_0$, де $G(\sigma)$ визначається виразом

$$G(\sigma) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\sigma/\sigma_p)^\beta}, \quad \beta > 0. \quad (2.7)$$

Особливість залежності (2.7) полягає в тому, що вона описує гістерезис при плавленні тонкого шару мастила тільки в координатах $T_e - \sigma$ [2, 25]. При цьому крива деформації $\sigma(\varepsilon)$ є монотонною і дозволяє представити лише безперервний перехід. Проте експериментальні дані однозначно вказують на те, що плавлення молекулярно-тонкої плівки мастила має стрибкоподібний характер [17], хоча і може відбуватися за механізмом фазового переходу другого роду. Як показано нижче, опис вказаної особливості досягається за допомогою заміни залежності $g(\sigma)$ у (2.1) на $g(\varepsilon) \equiv G(\varepsilon)/G_0$, де

$$G(\varepsilon) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\varepsilon/\varepsilon_p)^\beta}. \quad (2.8)$$

При цьому величина параметра $\beta > 0$, що визначає характер потенціалу, також грає ключову роль.

Розглянемо стаціонарний стан, при якому в (2.1) похідна $\dot{\sigma} = 0$ і величина напружень σ у мастилі не змінюються. Цей випадок згідно з (2.6) відповідає ковзанню з постійною швидкістю. Тоді отримуємо рівняння, подібне до закону Гука:

$$\sigma = g(\varepsilon)\varepsilon, \quad g(\varepsilon) = g_\theta \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\varepsilon/\alpha)^\beta} \right), \quad (2.9)$$

де параметр $\theta = \Theta/G < 1$, як і раніше, визначає відношення кутів нахилу кривої деформації на пластичній і гуківській ділянках, і з'являються нові коефіцієнти $g_\theta = \Theta/G_0 < 1$, $\alpha = \varepsilon_p/\varepsilon_s$. Залежність (2.9) в координатах $\beta - \varepsilon - \sigma$ при заданих α , g_θ і θ приведена на рис. 2.1. Для експериментів з апаратом поверхневих сил [19, 20] він представляє залежність повних внутрішніх зсувних напружень в мастилі $\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v$ від амплітуди відхилення x_{max} , де σ_{el} і σ_v — пружна і в'язка компоненти відповідно, причому σ_v визначається співвідношенням (2.6). Звідси випливає, що можуть реалізуватися дві ситуації: при малих β крива $\sigma(\varepsilon)$ монотонно зростає, а при

$$\beta > \frac{1 + \sqrt{\theta}}{1 - \sqrt{\theta}} \quad (2.10)$$

вона стає немонотонною. У першому випадку відбувається безперервне плавлення мастила. Другий випадок детальніше представлений на рис. 2.2, згідно з яким мастило при підвищенні напружень до точки A стрибкоподібно плавиться, переходячи в точку B . При подальшому збільшенні напружень деформація монотонно зростає, і мастило залишається рідиноподібним. Якщо тепер зменшувати

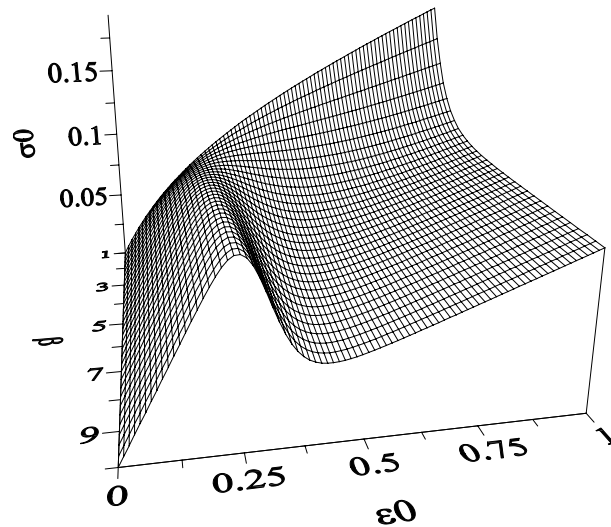


Рисунок 2.1— Залежність стаціонарного значення зсувних напружень σ_0 від деформації ε_0 і параметра β (2.9) при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\alpha = 0.3$.

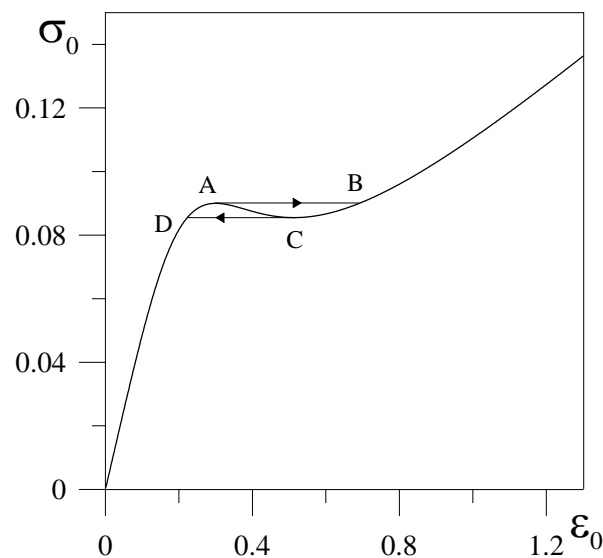


Рисунок 2.2— Залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 від деформації ε_0 (2.9) при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\alpha = 0.3$, $\beta = 3.0$, на якій показано гістерезисну поведінку.

напруження, то до точки C мастило зберігає рідиноподібну структуру, а потім стрибкоподібно твердіє при переході в точку D . При подальшому зменшенні напружень мастило твердоподібне. Дані переходи представлені як фазові переходи першого роду [26], але між станами, які не є істинними термодинамічними фазами. Для пояснення цих перетворень вводиться поняття зсувного плавлення [24]. Відмітимо, що така гістерезисна поведінка спостерігалася в експериментах [19, 20, 27].

Використовуючи рівняння (2.9), можна знайти абсциси точок переходу A і C :

$$\varepsilon_{A,C} = 2^{-1/\beta} \alpha \left[b(\beta - 1) - 2 \mp b \sqrt{(1 - \beta)^2 - 4\beta/b} \right]^{1/\beta}, \quad b = \theta^{-1} - 1, \quad (2.11)$$

де точці A відповідає знак “−”, а точці C — знак “+”. З (2.11) видно, що величина стрибка при плав-

ленні зростає із зростанням α , а із збільшенням β різниця $\varepsilon_A - \varepsilon_C$ прямує до нуля. Таким чином, при великих β (малих α) плавлення і твердіння здійснюються практично при однакових значеннях деформації ($\varepsilon_A \approx \varepsilon_C$), але при різних величинах напружень σ . Як і раніше, прийmemo в якості параметра порядку зсувні напруження σ : при $\sigma > \sigma_A$ мастило рідиноподібне, а якщо $\sigma < \sigma_C$, воно твердоподібне. У проміжній області $\sigma_C < \sigma < \sigma_A$ стан мастила є нестійким, оскільки воно може знаходитися в обох фазах.

В рамках адіабатичного наближення можна покласти $\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} \approx 0$, $\tau_T \dot{T} \approx 0$, і рівняння (2.2), (2.3) дають

$$\varepsilon = \sigma - (2 - T_e) \frac{\sigma}{1 + \sigma^2}, \quad (2.12)$$

$$T = T_e + (2 - T_e) \frac{\sigma^2}{1 + \sigma^2}. \quad (2.13)$$

Після підстановки виразу (2.12) в (2.1) отримаємо рівняння Ландау-Халатнікова, де синергетичний потенціал має вид

$$V = \frac{\sigma^2}{2} - g_\theta \int_0^\sigma \left[\sigma - (2 - T_e) \frac{\sigma}{1 + \sigma^2} \right] \left[1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\sigma/\alpha - \sigma(2 - T_e)/(\alpha + \alpha\sigma^2))^\beta} \right] d\sigma. \quad (2.14)$$

На рис. 2.3 подано залежність стаціонарних зсувних напружень σ_0 від температури поверхонь тертя T_e . Нижче за критичне значення T_{c0} напруження в мастилі відсутні ($\sigma = 0$), і воно твердо-

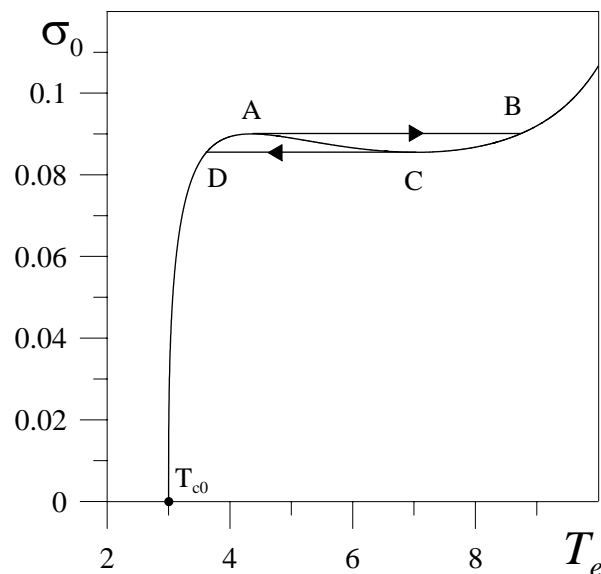


Рисунок 2.3— Залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 від температури поверхонь тертя T_e при параметрах рис. 2.2.

подібне. З подальшим зростанням температури до точки A напруження збільшуються, але відповідають гуківській пружній ділянці залежності, приведеної на рис. 2.2, і отже, мастило твердоподібне. При подальшому зростанні температури в інтервалі $T_{cA} < T_e < T_{cB}$ (T_{cA} , T_{cB} відповідають точкам A , B) напруження зберігаються, і мастило не змінює свою структуру. Вище T_{cB} реалізується

пластична ділянка залежності, показаної на рис. 2.2, мастило стає рідиноподібним. Якщо потім знижувати температуру поверхонь тертя, то до значення T_{cC} мастило рідиноподібне, далі до $T_e = T_{cD}$ напруження зберігається, і нижче за це значення воно має твердоподібну структуру. Вираз для критичної температури T_{c0} отримаємо з умови $\partial V/\partial \sigma = 0$, де V – синергетичний потенціал (2.14):

$$T_{c0} = 1 + \theta/g_\theta \equiv 1 + G_0/G \equiv 1 + g^{-1}. \quad (2.15)$$

В області температур $T_{cD} < T_e < T_{cB}$ мастило може бути як рідиноподібним, так і твердоподібним залежно від передісторії системи. В інтервалі $T_{cA} < T_e < T_{cC}$, що входить в цю область, стаціонарні значення напружень зберігаються. Очевидно, що рівність $\sigma_0 = \text{const}$ виконується із збільшенням температури при $T_{cA} < T_e < T_{cB}$, оскільки мастилу для плавлення необхідно передати енергію. В області $T_{cD} < T_e < T_{cC}$ при зменшенні температури поверхонь, що зсуваються, напруження зберігаються, оскільки для переходу мастила в твердоподібний стан воно повинне віддати енергію. Слід вважати, що твердоподібні структури мастила нижче і вище за точку T_{c0} відрізняються, оскільки згідно із рис. 2.3 перехід між ними відбувається за механізмом фазового переходу другого роду.

На рис. 2.4 показано залежність потенціалу (2.14) від величини напружень при фіксованих температурах поверхонь тертя. Крива 1 відповідає значенню температури нижче за T_{c0} . Видно, що

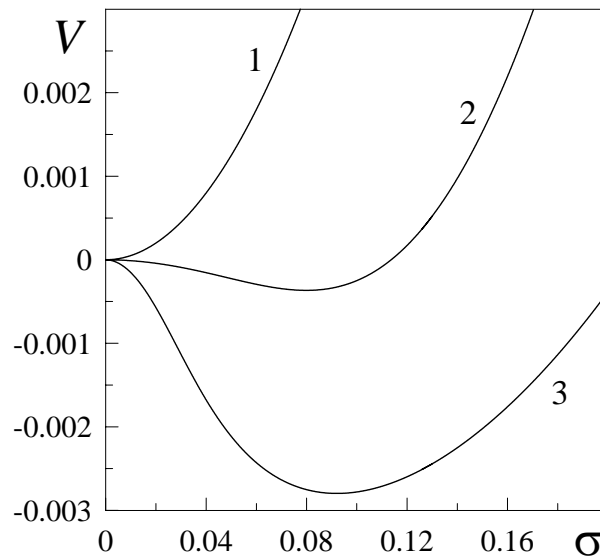


Рисунок 2.4— Залежність синергетичного потенціалу V (2.14) від величини зсувних напружень σ при параметрах рис. 2.2 і $T_e = 1.0, 3.4, 9.0$ (криві 1–3).

на ній реалізується єдиний нульовий мінімум, і в мастилі напруження відсутні, тобто воно твердоподібне. Крива 2 відповідає температурі $T_{c0} < T_e < T_{cD}$, і тут спостерігається ненульовий мінімум потенціалу, який відповідає гуківській ділянці рис. 2.2. Це означає, що мастило також твердоподібне. Криву 3 побудовано при $T_e > T_{cB}$, і вона характеризується одним ненульовим мінімумом

потенціалу. Оскільки за таких умов система знаходиться на ділянці пластичної течії, мастило рідкоподібне.

Перехід між першою і другою ситуаціями здійснюється за механізмом фазового переходу другого роду оскільки нульовий мінімум плавно перетворюється на ненульовий. Оскільки криві 2, 3 мають однакову форму, то перехід між відповідними режимами тертя слід інтерпретувати як кінетичне, а не фазове перетворення [26]. Таким чином, твердоподібна структура мастила при температурі нижче за T_{c0} є близькою до твердого стану. Твердоподібна ж структура вище вказаної температури несе ознаки рідкого стану, але в цілому мастило поводить себе як твердоподібне. При подальшому переході до рідкого режиму тертя в'язкість мастила зменшується, і воно тече.

2.2.2. Безперервне перетворення

Розглянемо тепер простіший випадок безперервного плавлення мастила, коли не виконується умова (2.10). При температурі поверхонь тертя нижче значення (2.15) мастило твердоподібне, оскільки зсувне напруження дорівнює нулю. При $T_e > T_{c0}$ воно починає плавитися і стає рідкоподібним. З подальшим підвищенням температури зсувні напруження ростуть і, як наслідок, настає ковзання, яке відповідає переходу на ділянку пластичної деформації.

На рис. 2.5 подані стаціонарні значення зсувних напружень σ_0 при безперервному перетворенні. Звідси видно, що із збільшенням коефіцієнта α при заданому значенні температури T_e ре-

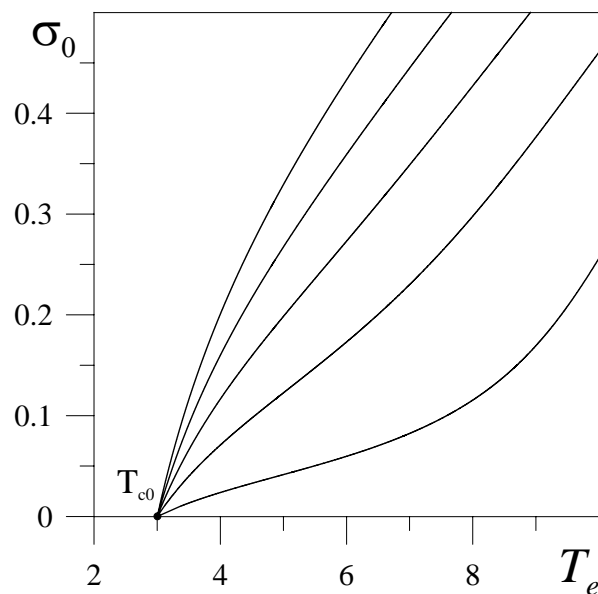


Рисунок 2.5— Залежність стаціонарного значення зсувних напружень σ_0 від температури поверхонь тертя T_e для випадку безперервного перетворення при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\beta = 1.0$ і $\alpha = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ (відповідні криві розташовані справа наліво).

алізуються більші значення стаціонарних напружень. Відповідно, при великих $\alpha < 1$ плавлення настає швидше, і такі мастила є кращими для зменшення тертя. Згідно з формулою (2.15), для

зменшення температури плавлення потрібно зменшувати θ і збільшувати g_θ . Мінімальне значення критичної температури зсувних поверхонь обмежено величиною $T_{c0} = 1$ при $\theta \ll g_\theta$.

Вид синергетичного потенціалу в даному випадку якісно збігається з показаним на рис. 2.4, оскільки він дається тією ж формулою (2.14). Твердоподібному стану мастила відповідає нульовий мінімум потенціалу, рідиноподібному – ненульовий мінімум.

2.2.3. Фазова кінетика

2.2.3.1. Координати $\sigma - \varepsilon$

Згідно з експериментальними даними для органічних змащувальних матеріалів [15, 17], час релаксації напружень при нормальному тиску складає $\tau_\sigma \sim 10^{-10}$ с. Оскільки ультратонка плівка мастила має менше чотирьох молекулярних шарів, час релаксації температури до значення T_e задовольняє умові:

$$\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon. \quad (2.16)$$

У відповідності із цим покладемо в рівнянні (2.3) $\tau_T \dot{T} \approx 0$. Також для зручності будемо вимірювати час в одиницях τ_σ . В результаті отримаємо двопараметричну систему наступного виду:

$$\dot{\sigma} = -\sigma + g(\varepsilon)\varepsilon, \quad (2.17)$$

$$\tau \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T_e - 1 - \sigma\varepsilon + \sigma^2)\sigma, \quad (2.18)$$

де $\tau \equiv \tau_\varepsilon/\tau_\sigma$. Відповідні фазові портрети приведені на рис. 2.6 і 2.7.

На рис. 2.6 показані фазові портрети, що описують поведінку мастила у твердоподібному стані (при значенні температури поверхонь тертя нижче, ніж T_{c0}), для різних співвідношень часів релаксації τ . Зокрема, рис. 2.6 а відповідає випадку $\tau = 0.01$. Штриховими лініями 1 і 2 показано

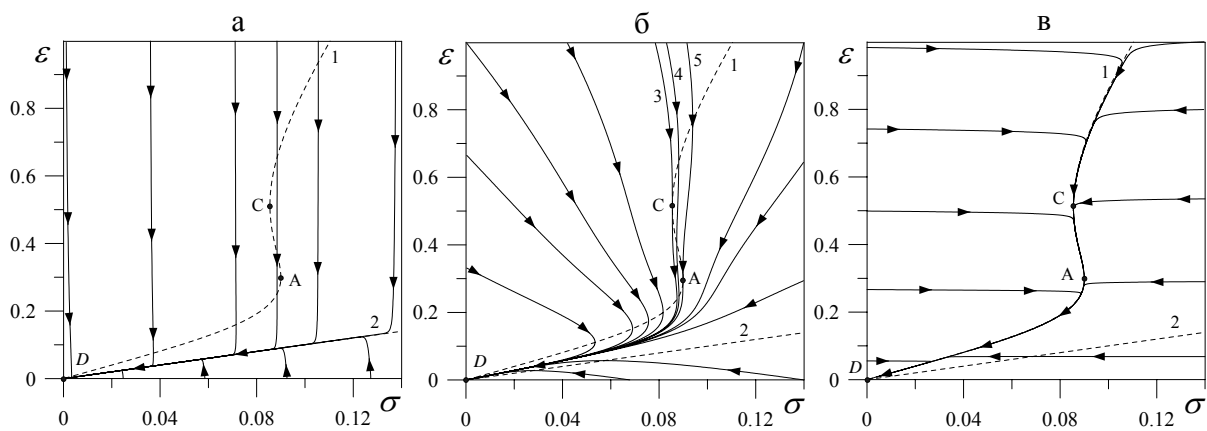


Рисунок 2.6— Фазові портрети при параметрах рис. 2.2 і $T_e = 2$: а – $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$; б – $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$; в – $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$.

ізокліни, що отримуються при прирівнюванні до нуля похідних в рівняннях (2.17) і (2.18) відповідно.

Таким чином, крива 1 відповідає параметрам системи, при яких напруження не змінюються, а лінія 2 відповідає випадку збереження деформації. Ці лінії перетинаються на початку координат, утворюючи єдину стаціонарну точку D , яка є вузлом. Видно, що фазові траєкторії сходяться до вузла D , тобто з часом напруження релаксують до нульового значення. Причому при русі по фазовій площині за довільних початкових умов спостерігаються два етапи: на першому відбувається миттєва релаксація системи до лінії, близької до ізокліни 2, на другому – повільний рух по вказаній кривій. На першому етапі напруження зберігаються, що нагадує описаний раніше перехід між режимами тертя. Відмітимо, що лінія, по якій рухається система на другому етапі, відповідає гуківській ділянці залежності $\sigma(\varepsilon)$. Таким чином, відбувається повільний перехід мастила з твердоподібної структури, що є близькою до рідини, до твердоподібної структури, схожої до твердого тіла.

Фазовий портрет, показаний на рис. 2.6 б, побудований для випадку, коли часи релаксації напружень і деформації збігаються ($\tau = 1$). Він також характеризується особливою точкою D , що представляє вузол. Тут можливі випадки, коли напруження σ спочатку збільшуються, а потім зменшуються, і навпаки. Це означає, що до того моменту, коли система прийде до рівноваги (початку координат), представляється можливим переривчастий рух. Наприклад, згідно з фазовими траєкторіями, які починаються при $\sigma = 0$, мастило спочатку твердоподібне (напруження дорівнюють нулю), потім воно починає плавитися (напруження зростають), і потім знову твердне. Найскладніший тип переривчастого руху описується фазовими траєкторіями, розташованими між траєкторіями 3 і 5, які є дотичними до ізокліни 1. Тут система поводить себе подібно до кривої 4, тобто напруження спочатку збільшуються, потім зменшуються (після першого перетину ізокліни 1), потім знову збільшуються (після другого перетину), і нарешті релаксують до нуля (після третього й останнього перетинів).

Рисунок 2.6 в відповідає випадку $\tau = 100$. Тут, як і на рис. 2.6 а, виділено два етапи: швидка релаксація до лінії, близької до ізокліни 1, і далі повільний рух по ній. На першому етапі деформація слабо змінюється, а напруження дуже швидко зменшуються, якщо початкові їх значення σ правіше ізокліни 1, або збільшуються при початкових σ лівіше її. На другому етапі у верхній частині фазового портрету (вище точки C) конфігураційна точка рухається по пластичній ділянці, нижче A відбувається рух по гуківській. На останній ділянці система знаходиться більш тривалий час, оскільки вона ближче до ізокліни, ніж перша.

На рис. 2.7 подано фазові портрети для таких же параметрів і співвідношень часів релаксації, як і на рис. 2.6, але при температурі, що відповідає ділянці пластичної деформації ($T_e > T_B$). Тут реалізується рідинне тертя, і з часом встановлюється ненульове стаціонарне значення зсувних напружень $\sigma_0 \neq 0$, що відповідає мінімуму потенціалу. Як і раніше, лінії 1 і 2 є ізоκлінами фазових траєкторій. Фазові портрети характеризуються двома особливими точками – сідлом D на початку координат і вузлом O при ненульових значеннях напружень і деформації, які даються перетином ізоκлін.

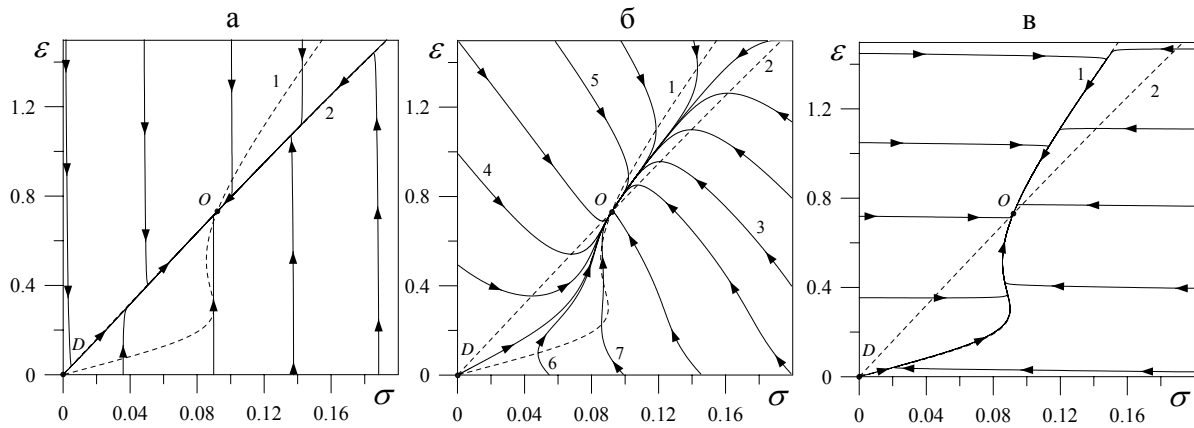


Рисунок 2.7— Фазові портрети при параметрах рис. 2.2 і $T_e = 9$: а — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$; б — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$; в — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$.

При $\tau = 0.01$ спостерігається картина, показана на рис. 2.7 а. Тут, як і на рис. 2.6 а, фазові траєкторії швидко збігаються до лінії, близької до ізокліни 2 з будь-якої точки фазової площини при збереженні напружень. Далі система релаксує до ненульового значення $\sigma_0 \neq 0$, і встановлюється стаціонарне рідинне тертя. Проте пряма, по якій здійснюється рух на другому етапі, відповідає пластичній ділянці залежності $\sigma(\varepsilon)$, тобто система завжди рідиноподібна, за винятком тих випадків, коли початкові значення напружень знаходяться поблизу нуля (відбувається плавлення). Відзначимо, що з часом мастило стає більш рідким, якщо $\sigma_i < \sigma_0$, і навпаки більш в'язким при $\sigma_i > \sigma_0$, де σ_i і σ_0 — початкове і стаціонарне значення напружень.

Як видно з рис. 2.7 б, для $\tau = 1$ при встановленні стаціонарного значення напружень і деформації можливі наступні випадки: мастило стає більш в'язким з часом (крива 3), воно плавиться (крива 4) і реалізуються різні переривчасті режими тертя (криві 5, 6, 7).

На рис. 2.7 в приведено фазовий портрет для $\tau = 100$, де як і на рис. 2.6 в, наявні два етапи. Основна відмінність цих рисунків полягає в тому, що на першому пластична ділянка є більш близькою до ізокліни, і при еволюції система знаходиться на ній більше часу, ніж на гуківській. Стаціонарна точка O знаходиться на пластичній ділянці.

2.2.3.2. Координати $\dot{\sigma} - \sigma$

Дослідимо кінетику системи, прослідкувавши еволюцію напружень і швидкості їх зміни. Для цього з двох диференційних рівнянь першого порядку (2.17), (2.18), залежних від напружень σ і деформації ε , отримаємо рівняння другого порядку для σ . З цією метою з (2.17) необхідно виразити ε через σ і записати похідну за часом від цього виразу. Далі, підставивши отримані залежності $\varepsilon(\sigma, \dot{\sigma})$, $\dot{\varepsilon}(\sigma, \dot{\sigma})$ у (2.18), знайдемо шукане рівняння. Проте аналітично виразити ε з (2.17) не представляється можливим. Тому скористаємося виразом (2.7), що описує безперервне плавлення, і отримаємо

шукане рівняння у вигляді:

$$A\ddot{\sigma} + B\dot{\sigma}^2 + C\dot{\sigma} + D = 0, \quad (2.19)$$

$$A \equiv \frac{\tau}{g_\theta} \left[\frac{1 + (\sigma/\alpha)^\beta}{\theta^{-1} + (\sigma/\alpha)^\beta} \right], \quad B \equiv \frac{\tau\beta}{g_\theta\alpha^\beta} \left[\frac{(\theta^{-1} - 1)\sigma^{\beta-1}}{(\theta^{-1} + (\sigma/\alpha)^\beta)^2} \right],$$

$$C \equiv A\tau^{-1} [\tau + 1 + \sigma^2] + \sigma B \quad D \equiv A\tau^{-1}\sigma [1 + \sigma^2] - \sigma(T_e - 1 + \sigma^2).$$

Воно описує реактивно-дисипативний режим, оскільки має другу і першу похідні за часом. Відповідні фазові портрети представлені на рис. 2.8. Тут штрихова крива 1 є ізокліною, на якій швидкість

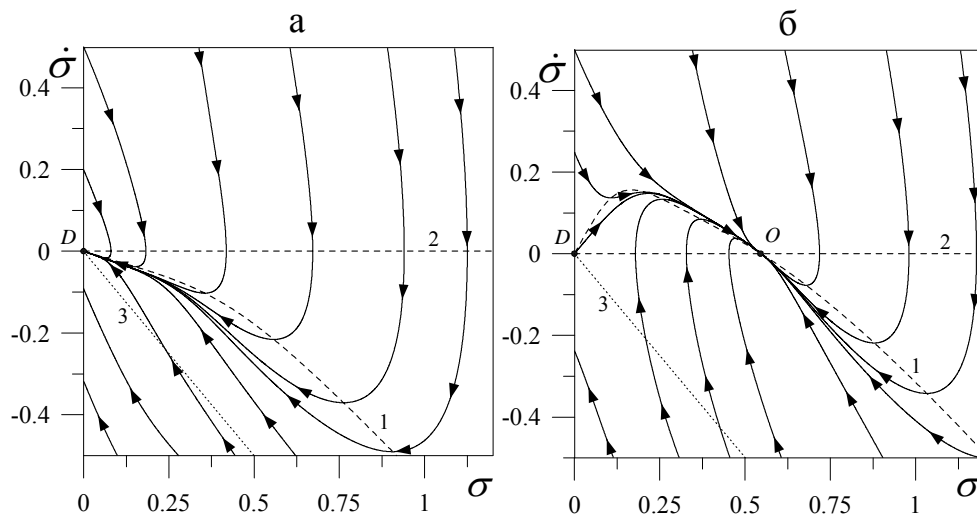


Рисунок 2.8— Фазові портрети при параметрах рис. 2.2 і з використанням залежності (2.7) для $\tau_\varepsilon = \tau_\sigma$: а — $T_e = 2$; б — $T_e = 9$.

зміни напружень залишається постійною ($\dot{\sigma} = 0$). Штрихова пряма 2 відповідає ізокліні, де напруження не змінюються ($\dot{\sigma} = 0$). Оскільки в рівнянні (2.19) деформація в явному вигляді відсутня, її початкові значення задаються за допомогою σ , $\dot{\sigma}$. Виявляється, що області, нижче за пунктирну пряму 3, що визначається рівністю $\dot{\sigma} = -\sigma$, відповідають від'ємні значення деформації. Тому деякі фазові траєкторії, що починаються нижче вказаної лінії, виходять у від'ємну область напружень. Оскільки у запропонованому підході розглядаються тільки позитивні значення напружень і деформації, початкові умови слід вибирати не нижче вказаної прямої.

На рис. 2.8 а представлений фазовий портрет, що відповідає температурі поверхонь тертя нижче критичної T_{c0} (2.15). Тут мастило твердоподібне, і спостерігається релаксація σ до вузла D на початку координат. Згідно з фазовими траєкторіям, при цьому також можливий переривчастий рух.

Випадку, коли температура T_e вище T_{c0} і мастило рідиноподібне, відповідає фазовий портрет, показаний на рис. 2.8 б. Він характеризується двома особливими точками — сідлом D і стійким вузлом O . Система з часом за довільних початкових умов (вище за прямою 3) приходить до стаціонарного стану, який відповідає точці O , і далі напруження не змінюються ($\dot{\sigma} = 0$). Видно, що релаксація

напружень може відбуватися за наявності переривчастих режимів тертя.

2.3. Гістерезисні явища при фазовому переході першого роду

2.3.1. Стрибкоподібне плавлення

Рисунок 2.3 відповідає випадку фазового переходу другого роду, оскільки у точці T_{c0} відбувається безперервний перехід, напруження при цьому стають ненульовими. Немонотонність на рис. 2.3 викликана наявністю нестійкої ділянки на рис. 2.2. Можна підібрати параметри таким чином, що крива $\sigma_0(\varepsilon_0)$ є монотонною, проте на залежності $\sigma_0(T_e)$ реалізується гістерезис.

На рис. 2.9 приведені відповідні залежності стаціонарних зсувних напружень σ_0 , σ^m від температури поверхонь тертя і деформації. Видно, що на рис. 2.9 б з'являється немонотонність, і в

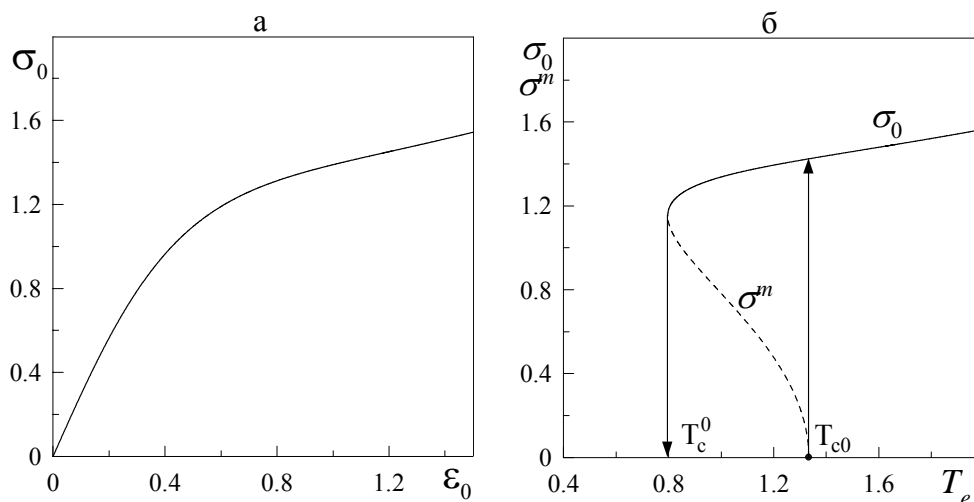


Рисунок 2.9— Залежності стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 , σ^m : а — від зсувної деформації ε_0 ; б — від температури поверхонь тертя T_e при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.6$, $\alpha = 0.7$, $\beta = 2.0$.

інтервалі $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ реалізується двозначна ділянка, яка властива фазовим переходам першого роду. Штрихова крива відповідає нестійким стаціонарним значенням напружень σ^m , суцільна — стійким σ_0 . Відзначимо, що $\sigma^m(T_e)$ відповідає гуківській ділянці залежності $\sigma_0(\varepsilon_0)$, яку показано на рис. 2.9 а.

На рис. 2.10 подано залежність потенціалу (2.14) від величини напружень при фіксованих температурах поверхонь тертя, яка відповідає параметрам рис. 2.9. Нижче за критичне значення T_c^0 напруження в мастилi відсутні ($\sigma_0 = 0$). Даному діапазону температур відповідає вид потенціалу, поданий кривою 1 на рис. 2.10, де реалізується один нульовий мінімум при $\sigma_0 = 0$, при цьому мастило твердоподібне. У точці $T_e = T_c^0$ на залежності $V(\sigma)$ з'являється плато. Із подальшим збільшенням температури в області $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ потенціал має вигляд кривої 2. Тут з'являється

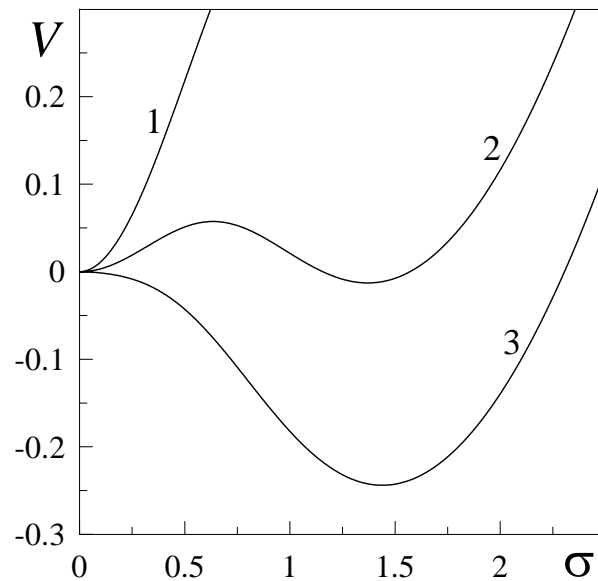


Рисунок 2.10— Залежність синергетичного потенціалу V (2.14) від величини зсувних напружень σ при параметрах рис. 2.9, криві 1 – 3 відповідають значенням температури $T_e = 0.6, 1.1, 1.4$ відповідно.

потенційний бар'єр, який розмежовує нульовий і ненульовий мінімуми потенціалу. У зв'язку з цим система не може прийти в стійкий стан $\sigma_0 \neq 0$ і реалізується нульове значення зсувних напружень σ . Пунктирна крива на рис. 2.9 відповідає максимуму потенціалу, суцільна крива – його ненульовому мінімуму. Як видно з рисунку, при $T_e = T_{c0}$ (2.15) відбувається стрибкоподібне збільшення значення σ , і система переходить на ділянку залежності $\sigma_0(T_e)$. Цей перехід пов'язаний з тим, що при $T_e = T_{c0}$ максимум $V(\sigma)$ зникає, і з подальшим зростанням T_e реалізується один ненульовий мінімум потенціалу (крива 3 на рис. 2.10). З подальшим збільшенням температури T_e стаціонарні значення напружень σ_0 зростають, і мастило стає менш в'язким. При цьому $V(\sigma)$ має вигляд кривої 3. Тепер із зменшенням температури до значення T_c^0 мастило рідиноподібне ($\sigma_0 \neq 0$), при $T_e = T_c^0$ воно стрибкоподібно твердіє ($\sigma_0 = 0$), оскільки на потенціалі зникає бар'єр і залишається один нульовий мінімум $V(\sigma)$.

Відмінною особливістю такої поведінки є те, що гуківська ділянка залежності цілком є нестійкою, оскільки відповідає максимуму потенціалу, й існує лише один тип твердоподібного стану мастила з нульовим значенням напружень.

2.3.2. Фазова кінетика

Для дослідження поведінки системи до встановлення стаціонарного стану методом фазової площини скористаємося рівняннями (2.17), (2.18), отриманими раніше.

При цьому фазові портрети в області температур $T_e < T_c^0$ виявляються аналогічними до приведених на рис. 2.6. Кінетика системи в температурній області $T_e > T_c^0$ рисунку 2.9 б, яка відповідає

стійкому рідинному тертю, якісно співпадає з показаною на рис. 2.7. Реалізується рідинне тертя, і з часом встановлюється ненульове стаціонарне значення зсувних напружень $\sigma_0 \neq 0$, що відповідає мінімуму синергетичного потенціалу $V(\sigma)$.

На рис. 2.11 приведені фазові портрети для температури, яка відповідає ділянці $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ рис. 2.9 б, на якій реалізуються стійкі та нестійкі значення стаціонарних зсувних напружень. Потенціал системи в цьому випадку має вигляд кривої 2 на рис. 2.10. Як і раніше, лінії 1 і 2 є ізоклі-

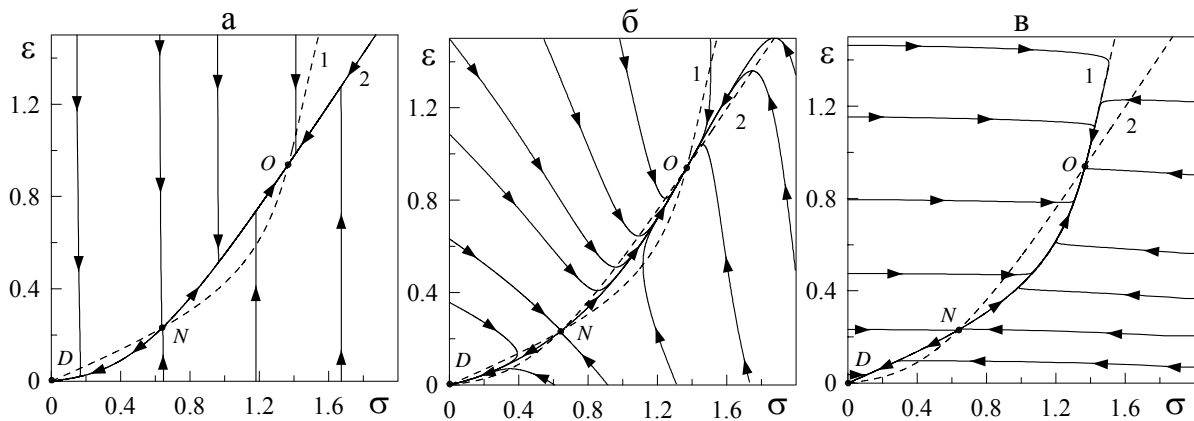


Рисунок 2.11— Фазові портрети при параметрах рис. 2.9 і $T_e = 1.1$: а — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$; б — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$; в — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$.

нами. Фазові портрети характеризуються трьома особливими точками: вузлом D на початку координат, який описує сухе тертя; сідлом N , що відповідає максимуму залежності $V(\sigma)$ (нестійка стаціонарна точка); вузлом O , якому відповідає ділянка пластичної течії на залежностях, приведених на рис. 2.9. Ці точки даються перетином ізоклін. Залежно від початкових умов система в результаті релаксації може прийти як до режиму стійкого сухого тертя (вузол D), так і до режиму тертя ковзання (точка O).

При $\tau = 0.01$ спостерігається картина, наведена на рис. 2.11 а. Тут, як і на рис. 2.6 а, фазові траєкторії швидко збігаються до лінії, близької до ізокліни 2, з будь-якої точки фазової площини при збереженні напружень. Далі система релаксує до вузла D або O , і встановлюється стаціонарний режим тертя, який визначається цими точками. Нахил кривої, по якій здійснюється рух на другому етапі, залежить від початкових умов. Так, до точки O система релаксує по пластичній ділянці ізокліни 2, до точки D — по її гуківській ділянці. З часом мастило стає більш рідким, якщо $\sigma_N < \sigma_i < \sigma_O$, і навпаки — більш в'язким при $\sigma_i > \sigma_O$, де σ_i і σ_O — початкове і стаціонарне значення напружень. У цих випадках система приходить до особливої точки O . При $\sigma_i < \sigma_N$ мастило з часом твердне, і реалізується сухе тертя (точка D).

Як видно з рис. 2.11 б, для $\tau = 1$ при встановленні стаціонарного значення напружень і деформації можливий переривчастий рух.

На рис. 2.11 в приведено фазовий портрет для $\tau = 100$, де, як і раніше, можна виділити

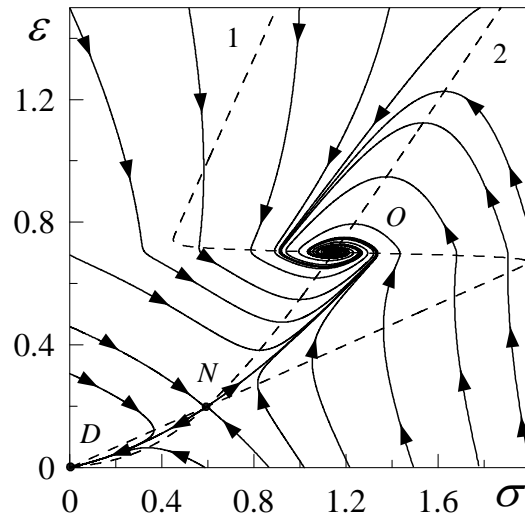


Рисунок 2.12— Фазовий портрет при параметрах рис. 2.11 б і $\beta = 100$.

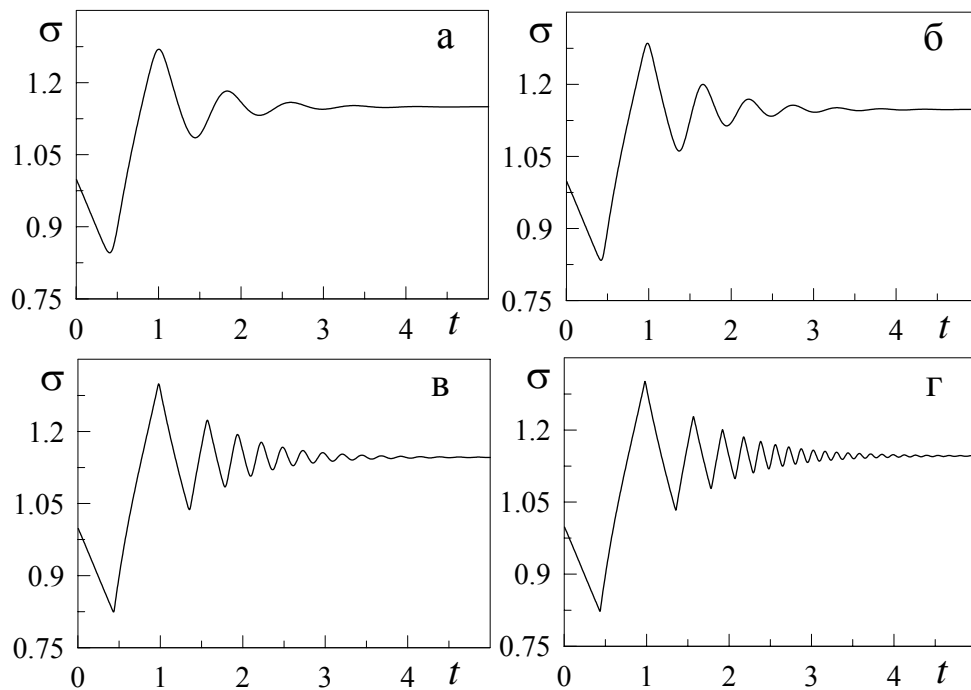


Рисунок 2.13— Релаксаційні залежності $\sigma(t)$, отримані при сумісному рішенні рівнянь (2.17), (2.18) для параметрів рис. 2.12. Рисунки а, б, в, г відповідають значенням параметра $\beta = 50, 100, 500, 1500$ відповідно.

два етапи. Спочатку напруження швидко релаксують до ізокліни 1, а потім здійснюється повільний рух до встановлення стаціонарного стану. Оскільки ізокліни 1 і 2 не мають якісних відмінностей (на обох реалізується пластична і гуківська ділянки залежності $\sigma_0(\varepsilon_0)$), поведінка системи на цьому рисунку якісно збігається з описаною для $\tau = 0.01$ (рис. 2.11 а). Відмінність полягає в тому, що на першому етапі тут постійна деформація, а не напруження.

На вид фазових портретів істотний вплив має величина параметра β . На рис. 2.12 подано

фазовий портрет при $\beta = 100$. Із вигляду ізокліни 1 можна зробити висновок, що гуківська і пластична ділянки на відповідній діаграмі навантаження стають при цьому більш вираженими. Проте основна відмінність цього випадку від приведеного на рис. 2.11 б полягає в тому, що точка O представляє не вузол, а фокус, що описує релаксаційні коливання аж до встановлення рівноваги. Такі коливання відповідають *stick – slip* режиму тертя. При збільшенні параметра β фазові траєкторії навколо фокусу розтягуються уздовж осі напружень, при цьому амплітуда *stick – slip* переходів зростає. Релаксаційні часові залежності напружень для параметрів рис. 2.12 приведені на рис. 2.13. Тут із збільшенням β коливання стають більш тривалими. На рис. 2.13 г залежність $\sigma(t)$ стає пилкоподібною, що спостерігається в експериментах. Режим, в якому при сталих швидкостях зсуву переривчасте тертя з часом переходило у режим ковзання, знайдений експериментально [5].

РОЗДІЛ 3

МОДЕЛЮВАННЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ УЛЬТРАТОНКОГО ШАРУ ВОДИ, СТИСНУТОГО МІЖ ЖОРСТКИМИ АЛМАЗНИМИ ПОВЕРХНЯМИ

У попередньому розділі наведено результати застосування феноменологічної моделі, а саме синергетичної системи Лоренца, для опису процесів, які мають місце в межовій плівці мастила. Основною слабкістю даного підходу і подібних ідеалізованих моделей є те, що для їх застосування необхідні припущення й апроксимації, що можуть привести до некоректних результатів. Також феноменологічний підхід як правило дає лише якісний опис нанотрибологічних процесів.

Комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки (МД) (яке ще називають комп'ютерним експериментом) є альтернативним методом для теоретичного дослідження процесів тертя на атомарному рівні. Воно подає компроміс між аналітичними моделями й експериментальними умовами і дуже широко використовується для розв'язання нанотрибологічних задач [4, 28–32].

У даному розділі описано МД моделювання ультратонкого шару води, стиснутого між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями. У першому підрозділі дається короткий огляд основних властивостей межових плівок і обґрунтування вибору досліджуваної системи. У другому підрозділі докладно описані умови моделювань, і в третьому підрозділі наведено основні результати комп'ютерних експериментів.

3.1. Властивості тонких плівок рідин, обмежених твердими поверхнями

Як показують експерименти й комп'ютерні моделювання, поведінка ультратонких плівок рідин, стиснутих між двома поверхнями, істотно відрізняється від поведінки об'ємних рідин. Для межових плівок є характерними наступні особливі властивості [4, 5, 17, 28]:

1. Молекули рідин, стиснутих між атомарно-плоскими поверхнями стають більш упорядкованими і прагнуть утворювати квазідискретні шари, у яких середня локальна густина рідини осцилює із відстанню, нормальною до поверхонь.
2. Рухливість молекул у стиснутих плівках суттєво зменшується у порівнянні із об'ємними рідинами. Це виявляється у зменшенні коефіцієнту дифузії і у збільшенні в'язкості й молекулярних часів релаксації. “Ефективна” в'язкість може перевищувати об'ємну в 10^5 разів, а часи релаксації можуть бути більшими за об'ємні у 10^{10} разів.

3. Межове мастило може проявляти дві різні реакції на зсув: рідиноподібну, за якої рідина тече при появі деформації, і твердоподібну, що характеризується наявністю границь текучості у плівці. У комп'ютерних моделюваннях простих леннард-джонсівських (ЛД) рідин між атомарно-структурованими поверхнями було передбачено різкі переходи рідина-тверде тіло у плівках, тонших 6 молекулярних діаметрів. При цьому молекули впорядковуються як перпендикулярно, так і паралельно до поверхонь. Однак, горизонтальне впорядкування зникає для неструктурованих, тобто математично гладеньких поверхонь. У стиснутих плівках як позиційне, так і орієнтаційне впорядкування обумовлені не тільки взаємними взаємодіями молекул рідини, а й наявністю двох близько розташованих твердих поверхонь.
4. Для швидкостей зсувних поверхонь, менших деякого критичного значення, може мати місце переривчастий рух (stick-slip motion). Він характеризується почерговими зупинками (stick) і проковзуваннями (slip).

Для пояснення наведених властивостей межових плівок різноманітних рідин широко застосовують МД моделювання. Зокрема, досліджено властивостей рідин із сферичними молекулами [4, 30, 31], й алканів, молекули яких мають ланцюгову форму [28].

У даній роботі проведено комп'ютерні експерименти для ультратонкої плівки води, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями. Вибір води в якості рідини для моделювання обумовлений її важливістю, повсюдністю, й унікальними властивостями, зокрема у трибологічному відношенні [5, 33]. Так, введення моношару води (товщиною лише 0.25 нм) між атомарно-плоскими поверхнями слюди в апараті поверхневих сил (АПС) обумовлює зменшення тертя більш, ніж на порядок величини [34]. Ефективність моношару води у зменшенні тертя пояснюється "гідрофільністю" слюдяних поверхонь й існуванням у водних розчинах сильних відштовхуючих короткодійючих сил гідратації між цими поверхнями, які ефективно усувають контрольований адгезією внесок у силу тертя. За описуваних умов сила тертя відповідає першому закону Амонтона, який стверджує, що сила тертя є пропорційною до зовнішнього навантаження.

Метою даних досліджень є вивчення поведінки плівки води, яка складається з ТІР4Р молекул, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними пластинами, і перевірка відповідності моделі до експериментів й інших моделювань. Результати, у свою чергу, можуть дати оцінку надійності використання ТІР4Р моделі молекул води й апроксимації абсолютно жорстких пластин у моделюваннях нанотрибологічних систем.

3.2. Модель

3.2.1. Загальна схема комп'ютерного експерименту

Моделювання проводилися для плоскої геометрії Куетта, що сильно нагадує експериментальні системи, досліджувані за допомогою АПС [4, 28–32]. Розглядалася тонка плівка молекул води, обмежена двома твердими стінками із періодичними граничними умовами в площині пластин, застосованими як до рідини, так і до поверхонь. Вивчалися атомарно-гладенькі й атомарно-шорсткі пластини. У першому випадку кожна стінка складається із 1152 атомів, що утворюють дві кристалічні (001) поверхні з алмазною решіткою. У другому періодичний атомарний рельєф забезпечувався видаленням 144 атомів, що знаходяться безпосередньо на поверхні. Усі значення параметрів моделювання поверхонь із різним рельєфом є однаковими, за винятком того, що у випадку шорстких поверхонь введена слабка взаємодія поверхонь однієї з одною. Хоча вивчення тертя алмазних поверхонь, розділених плівкою води, ще не проводилися експериментально, однак діамант є прозорим для світла, і, отже, може бути використаний у дослідженнях з АПС. Для спрощення задачі пластини вважаються абсолютно жорсткими, і модель не враховує пружності поверхонь. Але, беручи до уваги, що алмаз є одним із найтвердіших матеріалів, у даній роботі вирішено перевірити це наближення. Досліджувалися плівки води, що складаються з одного і двох шарів молекул. Кожний шар містить $14 \cdot 14 = 196$ молекул, отже максимальна кількість молекул, що використовувалася в моделюваннях, дорівнює 2696.

На рис. 3.1 подані початкові конфігурації системи для плівок товщиною один і два молекулярних шари, стиснутих між гладенькими поверхнями. На рис. 3.2 – між атомарно-шорсткими, а на рис. 3.3 – вид “згори” (у від’ємному напрямку осі z) початкової конфігурації молекул води і кристалічної площини.

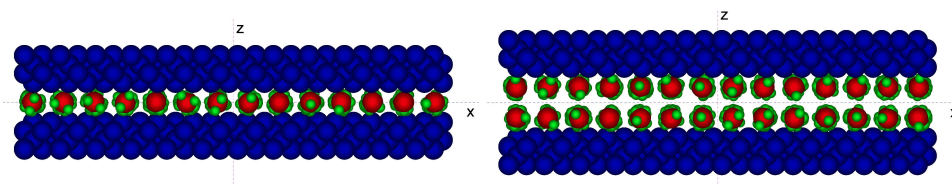


Рисунок 3.1— Початкова конфігурація системи для плівки води з одного і двох шарів молекул, стиснутої між гладенькими поверхнями. Атоми вуглецю, кисню й водню зображені відповідно синіми, червоними й зеленими кульками.

Для візуалізації атомів використовувалися емпіричні значення їх ковалентних радіусів, які для вуглецю, кисню і водню відповідно становлять 77, 73 і 37 пм ($1 \text{ пм} = 10^{-12} \text{ м}$), стала решітки алмазу дорівнює 356.68 пм [35]. Молекули води на початку моделювань розміщувалися у верши-

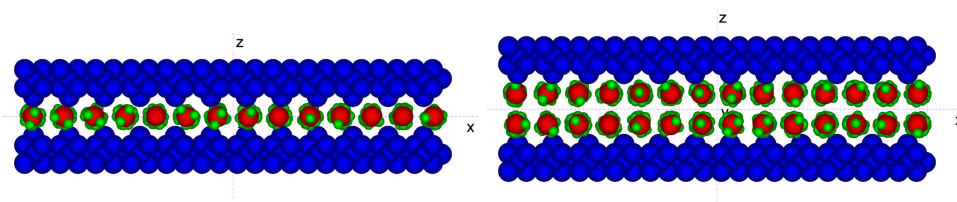


Рисунок 3.2— Початкова конфігурація системи для плівки води з одного і двох шарів молекул, стиснутої між атомарно-шорсткими поверхнями із періодичним рельєфом.

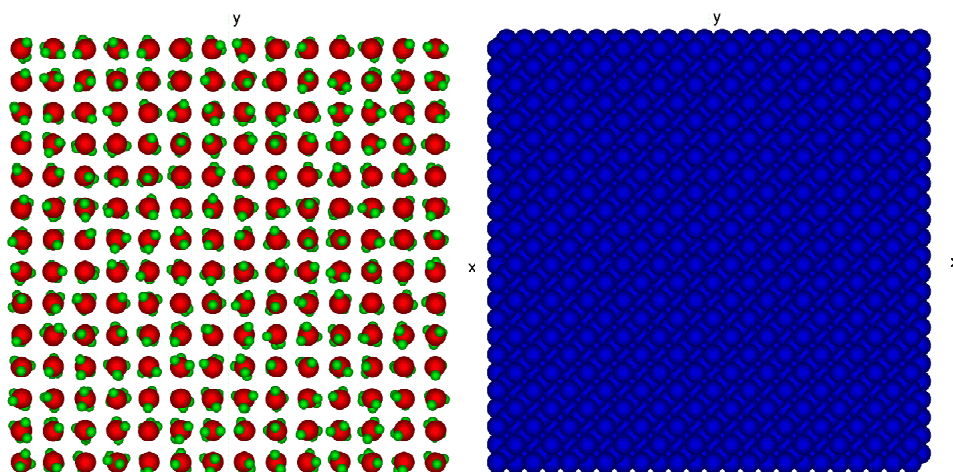


Рисунок 3.3— Розташування молекул води (ліворуч) і вид алмазної поверхні (праворуч) у площині xy на початку моделювань.

нах кубічної решітки із сталою решітки, що відповідає значенню 1048 кг/м^3 густини води, яке є близьким до об'ємного (за нормальних умов) значення 1000 кг/м^3 . Пластини і молекули води несумірні, оскільки стала решітки алмазу й відстань між молекулами води не співпадають. Початкова відстань (щілина) між поверхнями для одного шару молекул становить 0.3104 нм , для двох шарів 0.6207 нм . Горизонтальні розміри комірки моделювання в напрямках осей x і y однакові й дорівнюють 42.81 \AA .

Щоб імітувати експерименти, моделювання проводилися при сталих значеннях температури і навантаження, прикладеного до стінок. Температура становила 298 К , а навантаження моделювалося шляхом дії сталої сили L на кожен атом площин вздовж осі z . Зсув також імітувався прикладенням сталої горизонтальної сили F_S до кожного атому верхньої площини вздовж осі x , і в даній роботі використовувався алгоритм сталої сили зсуву [32].

3.2.2. Модель води

Для пояснення властивостей води потрібна деяка картина розподілу заряду в її молекулі. Були запропоновані різноманітні моделі, наприклад, ST2, TIP3P та ін., але ще досі не існує єдиної

моделі, яка була б спроможною задовільно врахувати властивості води у всіх трьох фазах (лід, рідина і пара) [33]. Основною вимогою до будь-якої моделі води є те, що вона повинна відтворювати тетраедричну структуру, обумовлену водневими зв'язками.

У даній роботі використовується модель, яка задовольняє вказану умову, і в якій молекула вважається жорсткою, — TIP4P модель [36]. Взаємодія між жорсткими молекулами найбільш легко вводиться шляхом визначення розташування на молекулі ділянок (сайтів або центрів), на які діють сили. Тоді результуюча сила, що діє між двома молекулами, буде просто дорівнювати сумі сил між усіма парами сайтів взаємодій. Щоб розрахувати взаємодію між парами сайтів, достатньо знати відстань між центрами мас двох молекул і їх орієнтацію у просторі.

Модель молекули подана на рис. 3.4. Вона базується на чотирьох сайтах, розміщених в одній площині. Два з них — позначені як М і О — пов'язані із ядром кисню, інші два — позначені через Н — із ядрами водню. Сайт М лежить на осі симетрії молекули між сайтом О і лінією, яка з'єднує Н сайти.

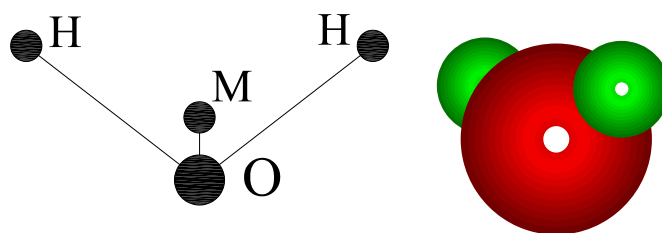


Рисунок 3.4— Схематичне зображення TIP4P молекули води (ліворуч) [36], вид молекули при візуалізації в програмі (праворуч).

Відстані та кут, необхідні для повного визначення координат сайтів, мають наступні значення: $r_{OH} = 0.957 \text{ \AA}$, $r_{OM} = 0.15 \text{ \AA}$, $\angle HOH = 104.5^\circ$. Енергія взаємодії між двома молекулами i та j складається із подвійної суми за всіма сайтами обох молекул. Члени з індексами k і l враховують кулонівську взаємодію між електричними зарядами, пов'язаними із сайтами, а також внески ЛД типу:

$$u_{ij} = \sum_{k \in i} \sum_{l \in j} \left(\frac{q_k q_l}{r_{kl}} + \frac{A_{kl}}{r_{kl}^{12}} - \frac{C_{kl}}{r_{kl}^6} \right), \quad (3.1)$$

де $\mathbf{r}_{kl} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l$ — відстань між сайтами k і l , $r_{kl} \equiv |\mathbf{r}_{kl}|$. Відповідна сила визначається виразом

$$\mathbf{f}_{ij} = \sum_{k \in i} \sum_{l \in j} \left(\frac{q_k q_l}{r_{kl}^3} + \frac{12A_{kl}}{r_{kl}^{14}} - \frac{6C_{kl}}{r_{kl}^8} \right) \mathbf{r}_{kl}. \quad (3.2)$$

Заряди мають наступні значення: $q_H = 0.52e$, $q_O = 0$, $q_M = -2q_H$, де $e = 1.6 \times 10^{-19}$ Кл. Параметри ЛД частини потенціалу, що діє тільки між О сайтами, наступні: $A_{OO} \equiv A = 600 \times 10^3$ (ккал/моль) \AA^{12} , $C_{OO} \equiv C = 610$ (ккал/моль) \AA^6 , і 1 ккал/моль=4184 Дж/моль.

У моделюваннях використовуються безрозмірні одиниці вимірювання. Одиниця виміру довжини $\sigma = (A/C)^{1/6} = 3.154 \text{ \AA}$, одиниця виміру енергії $\varepsilon = A/(4\sigma)^{12} = 0.155 \text{ ккал/моль}$. За одиницю виміру маси вибираємо масу молекули води $m = 2.987 \times 10^{-27} \text{ г}$ й одиницю виміру часу $t_0 = \sqrt{m\sigma^2/\varepsilon} = 5.253 \times 10^{-12} \text{ с}$. Також визначимо безрозмірні одиниці виміру заряду, у яких $q_H = 1$. Часовий крок, що використовувався, мав значення $\Delta t = 0.0005$; у розмірних одиницях це дорівнює $2.627 \times 10^{-15} \text{ с}$.

Наведемо безрозмірні й розмірні значення сил, що використовувалися в моделюваннях. Значення сили L на кожен атом змінювалися від 2 (у системі СІ це 6.838 пН) до 150 (0.513 нН), що відповідають значенням тиску на кожну поверхню від 0.43 ГПа до 32.254 ГПа. Враховуючи, що поріг пластичності алмазу порядку 100 ГПа [4], обробці підлягали результати для тисків, менших 20 ГПа, оскільки для більших значень тисків деформація поверхонь, яка не взята до уваги в розглядуваній моделі, повинна відігравати значну роль. Горизонтальна сила F_S зсуву на кожен атом верхньої пластини змінювалася від 0.5 (1.71 пН) до 100 (0.342 нН), або повна горизонтальна сила на поверхню змінювалася від 1.97 нН до 0.394 мкН. У подальшому викладенні будуть використовуватися лише безрозмірні значення сил, діючих на кожен атом.

Що стосується взаємодії води із алмазними поверхнями, вважалось, що із атомами вуглецю взаємодіє лише сайт О молекули води, потенціал має ЛД вид:

$$u_{ij} = \begin{cases} 4\varepsilon_{CO} \left[\left(\frac{\sigma_{CO}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{CO}}{r_{ij}} \right)^6 \right], & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases}, \quad (3.3)$$

де $r_c = 7.5 \text{ \AA}$ (або 2.38 у безрозмірних одиницях) – відсічна відстань, $\varepsilon_{CO} = 2$, $\sigma_{CO} = 0.86$. Значення останніх параметрів вибрано таким чином, щоб задовільнити експериментальний факт, що алмаз є гідрофільним [37]. Вони відповідають удвічі більшому притягання молекул води до атомів вуглецю, ніж до молекул води.

3.2.3. Рівняння руху

У моделюваннях використовувалися класичні рівняння руху. Завдяки абсолютній жорсткості пластин до уваги береться рух їх центрів мас. Для верхньої пластини рівняння руху мають наступний вигляд:

$$\begin{aligned} M\ddot{X} &= F_x + F_S N_p, \\ M\ddot{Y} &= F_y, \\ M\ddot{Z} &= F_z + L N_p, \end{aligned} \quad (3.4)$$

де X, Y, Z – координати центру мас верхньої пластини, N_p – кількість атомів стінки, $M = N_p m_C$ – маса пластини, $m_C = 0.67$ – маса атому вуглецю, F_x, F_y, F_z – компоненти результуючої сили, що діє на поверхню з боку води. Останні дорівнюють сумі похідних (із від'ємним знаком) за відповідною координатою від потенціалу (3.3) для всіх молекул. За відсутності зовнішніх горизонтальних

сил має виконуватися закон збереження імпульсу вздовж осей x та y , і центр мас пластин не повинен рухатися у цих напрямках. У даній роботі дрейф центру мас (внаслідок чисельних округлень і, можливо, через ефекти, обумовлені способом підтримання сталої температури) протягом періоду обчислень мав величину порядку одного значення сталої решітки алмазу. Рівняння руху для нижньої стінки аналогічні до (3.4). Різниця полягає у відсутності компоненти, відповідальної за зсув, у правій частині першого рівняння у (3.4).

Рівняння поступального руху (без компоненти, відповідальної за підтримку сталої температури) для центру мас i -ї молекули води має вид:

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_j \mathbf{F}_{ij} + \sum_k \mathbf{f}_{ik}, \quad (3.5)$$

де $\sum_j \mathbf{F}_{ij}$ – сила, що діє з боку всіх атомів вуглецю, які знаходяться від i -ї молекули на відстані, меншій r_c , і визначається аналогічно як і для поверхонь; $\sum_k \mathbf{f}_{ik}$ – сила, що діє на i -ту молекулу з боку інших молекул води, які знаходяться від даної молекули на відстані, меншій r_c , і визначається за формулою (3.2).

У розглядуваній моделі також враховується обертальний рух молекул води. Для опису обертання застосовуються гамільтонови кватерніони [36]. Одна із очевидних переваг кватерніонів – відсутність тригонометричних функцій при побудові матриці повороту. Компоненти кутової швидкості $\omega'_x, \omega'_y, \omega'_z$ пов'язані із похідними за часом від компонент q_1, q_2, q_3, q_4 кватерніону співвідношенням:

$$\begin{pmatrix} \omega'_x \\ \omega'_y \\ \omega'_z \\ 0 \end{pmatrix} = 2W \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{q}_3 \\ \dot{q}_4 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

де

$$W = \begin{pmatrix} q_4 & q_3 & -q_2 & -q_1 \\ -q_3 & q_4 & q_1 & -q_2 \\ q_2 & -q_1 & q_4 & -q_3 \\ q_1 & q_2 & q_3 & q_4 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Рівняння Ейлера, які описують обертання твердого тіла, мають вид:

$$I_x \dot{\omega}'_x = n_x + (I_y - I_z) \omega'_y \omega'_z \quad (3.8)$$

й аналогічно для інших компонент. У (3.8) \mathbf{n} – момент сил, що діють на тіло, I_x, I_y, I_z – головні моменти інерції молекули, $I_y = m_O z_O^2 + 2m_H z_H^2 = 0.0034$, $I_z = 2m_H y_H^2 = 0.0064$, $I_x = I_y + I_z$, маси

m_O і m_H асоціюються із сайтами O і H , $m_O = 2m_H$. Рівняння руху через кватерніони має вид:

$$\begin{pmatrix} \ddot{q}_1 \\ \ddot{q}_2 \\ \ddot{q}_3 \\ \ddot{q}_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} W^T \begin{pmatrix} \dot{\omega}'_x \\ \dot{\omega}'_y \\ \dot{\omega}'_z \\ -2 \sum \dot{q}_m^2 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Можна виключити компоненти $\dot{\omega}'_i$ із правої частини (3.9), використовуючи рівняння Ейлера (3.8). Після заміни компонент $\dot{\omega}'_i$ лінійними комбінаціями величин \dot{q}_i із (3.6) отримуємо набір рівнянь руху, виражених повністю через кватерніони і їх похідні. Рівняння руху як для координат центрів мас пластин і молекул, так і для кватерніонів інтегрувалися із застосуванням алгоритму предиктор-коректор четвертого порядку.

3.2.4. Контроль температури

Звичайна МД відрізняється від більшості експериментальних досліджень тим, що у моделюванні фіксованими є енергія E і об'єм V , а не температура T і тиск P . У термінах статистичної механіки МД дає середні за мікроканонічним ансамблем NVE (N – кількість молекул), у той час як експерименти із сталою температурою відповідають канонічному ансамблю NVT .

Для проведення моделювань, наближених до експериментів, необхідно використовувати канонічний ансамбль, і, отже, підтримувати сталю температуру. Оскільки зовнішніми силами над системою виконується робота, то підтримання сталої температури означає вибір способу відведення надлишку тепла або сполучення системи із термостатом. У реальних тілах відтік тепла відбувається за рахунок багатьох механізмів, наприклад, збудження фононів або генерації пар електрон-дірка, енергія яких потім перетворюється в тепло [4]. У моделюваннях можна як явно вводити способи відведення тепла, так цього і не робити. Наприклад, для досліджуваної у даній роботі системи електронну теплопровідність можна не брати до уваги внаслідок чудових діелектричних властивостей алмазу, а для металів вкладом електронної теплопровідності нехтувати не можна.

Найбільш поширеним способом контролю температури при моделюванні трибологічних явищ є застосування термостату Ланжевена [4, 29, 31, 32]. У даній роботі використовуються нерівноважні рівняння руху, або, як ще кажуть, накладаються механічні обмеження (або граничні умови) [29, 36]. Існує декілька очевидних переваг цього підходу:

1. Він не заснований на апроксимаційних вихідних положеннях, наприклад таких, як частота Дебая, що має місце у спрощеному термостаті Ланжевена. Тому втрати і приріст тепла визначаються лише неявними властивостями системи.
2. Оскільки не вимагаються випадкові сили, цей метод значно прискорює обчислення.

3. Рівняння руху (на відміну від термостату Ланжевена) є оборотними за часом.
4. Диференціюючи енергію за часом, можна безпосередньо обчислити втрати (або приріст) тепла завдяки термостатові.

Однак прив'язування тертя до глобальних властивостей системи зазвичай є повільним, щоб зробити випадковими нефізичні вібраційні збурення. Останні могли бути причиною згаданого вище дрейфу центру мас поверхонь. Відмітимо, що внаслідок абсолютної жорсткості поверхонь модифікувалися лише рівняння руху молекул води.

Опишемо більш докладно розглядуваний метод. Накладання сталої температури зводиться до введення неголономного зв'язку у рівняння руху для фіксування кінетичної енергії. Насправді це грає роль математичного термостату. Доведення впливає не із гамільтонового варіаційного принципу, а з іншого формулювання механіки, відомого як гаусівський принцип найменшого обмеження. Можна показати, що рівноважні властивості такої ізотермічної системи будуть такими ж, як і канонічного ансамблю. Гранична умова базується на поступальній і обертальній кінетичній енергіях. Для кожної молекули у поступальні рівняння руху (3.5) вводиться доданок, що містить множник Лагранжа, а також у кожне з рівнянь Ейлера (3.8) додається член загального виду $\alpha I_x \omega'_x$. Оскільки повна кінетична енергія дорівнює

$$N_m E_k = \frac{1}{2} m \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_x I_x \sum_i \omega_{ix}^{\prime 2}, \quad (3.10)$$

де \sum_x означає суму за всіма векторними компонентами, m – маса молекули води і N_m – кількість молекул води, то, покладаючи $\dot{E}_k = 0$, ми отримаємо:

$$\alpha = - \frac{\sum_i \dot{\mathbf{r}}_i \mathbf{f}_i + \sum_i \omega'_i \mathbf{n}_i}{m \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + \sum_x I_x \sum_i \omega_{ix}^{\prime 2}}, \quad (3.11)$$

де \mathbf{f}_i і \mathbf{n}_i – повні сила і момент сил, що діють на i -ту молекулу. Для проведених у даній роботі обчислень дрейф температури становив порядку кількох відсотків від значення температури системи.

3.2.5. Особливості вимірювань

У процесі моделювання проводилися дві групи вимірювань. Одні мали місце за відсутності зсувної сили F_S , і в них вимірювалися коефіцієнт дифузії та зсувна в'язкість. Для інших зсувні сили були ненульовими, вимірювалася кінетична сила тертя, що діє на верхню поверхню. Вона подана першим доданком у першому рівнянні (3.4), що дорівнює загальній силі, яка діє з боку води на поверхню.

Коефіцієнт дифузії розраховувався двома способами. Перший – із використанням формули Ейнштейна, яка має вигляд [36]:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6N_m t} \left\langle \sum_{j=1}^{N_m} [\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_j(0)]^2 \right\rangle, \quad (3.12)$$

де t – час вимірювання. У (3.12) кутові дужки означають усереднення за достатньо великою кількістю незалежних зразків системи.

Другий спосіб – із застосуванням альтернативного виразу Гріна - Кубо для D , заснованого на інтегрованій автокореляційній функції швидкості $\varphi(t)$ [36, 38]

$$D = \frac{1}{3N_m} \int_0^\infty \varphi(t) dt, \quad (3.13)$$

$$\varphi(t) = \left\langle \sum_{j=1}^{N_m} \mathbf{v}_j(t) \cdot \mathbf{v}_j(0) \right\rangle, \quad (3.14)$$

де \mathbf{v}_j – швидкість j -ї молекули. Можна показати, що два вирази (3.12) і (3.13) дають абсолютно еквівалентні результати.

Як відмічалось, на початку кожного моделювання молекули води розміщуються у вершинах кубічної решітки. При цьому молекулярна орієнтація набуває випадкових значень, кутова і лінійна швидкості кожної молекули мають фіксоване значення, залежне від температури, і випадково вибраний напрямок. Кутові координати і швидкості переводяться у кватерніонну форму, а лінійні та кутові прискорення, що використовуються при інтегруванні рівнянь руху, покладаються рівними нулю. Під час моделювання протягом перших 2000 часових кроків відбувалося досягнення системою рівноважного стану, після чого або одразу вимірювалися рівноважні властивості, або прикладалася зсувна сила і вимірювалася сила тертя. Максимальна тривалість моделювань складала 55000 часових кроків або 144.4 пс.

3.3. Результати й обговорення

3.3.1. Плівка води між гладенькими поверхнями

На рис. 3.5 подані розраховані часові залежності автокореляційних функцій швидкостей молекул води для різних значень навантаження. Видно, що із зростанням навантаження амплітуда і кількість осциляцій зростає. Це вказує на те, що за високих навантажень швидкості молекул стають більш корельованими.

Поступове спадання коефіцієнту дифузії із зростанням зовнішнього навантаження на рис. 3.6 і 3.7, вказує на перехід плівки води до твердоподібного стану [31]. Особливістю останнього, як відмічалось, є впорядкування молекул плівки, яке може бути як вертикальним, тобто у вигляді шарів, так і площинним. Аналітично перше виявляється у набутті просторовою залежністю густини плівки осцилюючого вигляду, а друге – в особливій формі структурного фактору рідини. У даній роботі розрахунок вказаних величин не проводився, але утворення шарів можна було спостерігати

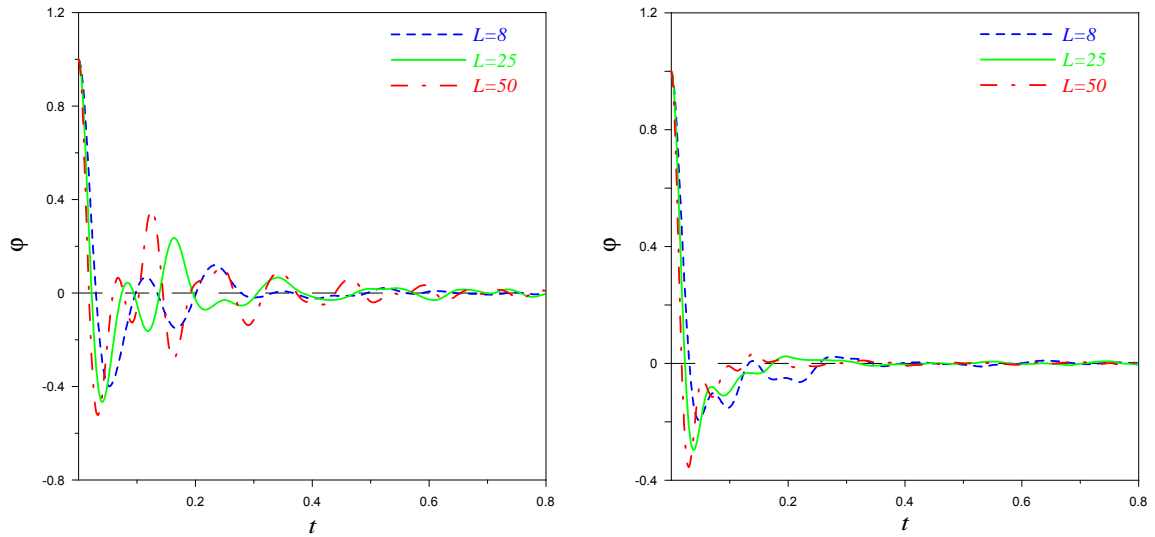


Рисунок 3.5— Часові залежності автокореляційних функцій швидкості (3.14) для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між гладенькими пластинами за різних значень навантаження.

візуально. На рис. 3.8 наведено типове вертикальне впорядкування молекул води для двох значень навантаження.

Для плівки товщиною один молекулярний діаметр горизонтальне впорядкування не спостерігалось за всіх значень навантаження і зсувної сили. Однак для плівки товщиною два молекулярні діаметри площинне впорядкування має місце, особливо за високих навантажень. На рис. 3.9 подано невпорядкований стан молекул і декілька варіантів впорядкованих конфігурацій у кінці відпо-

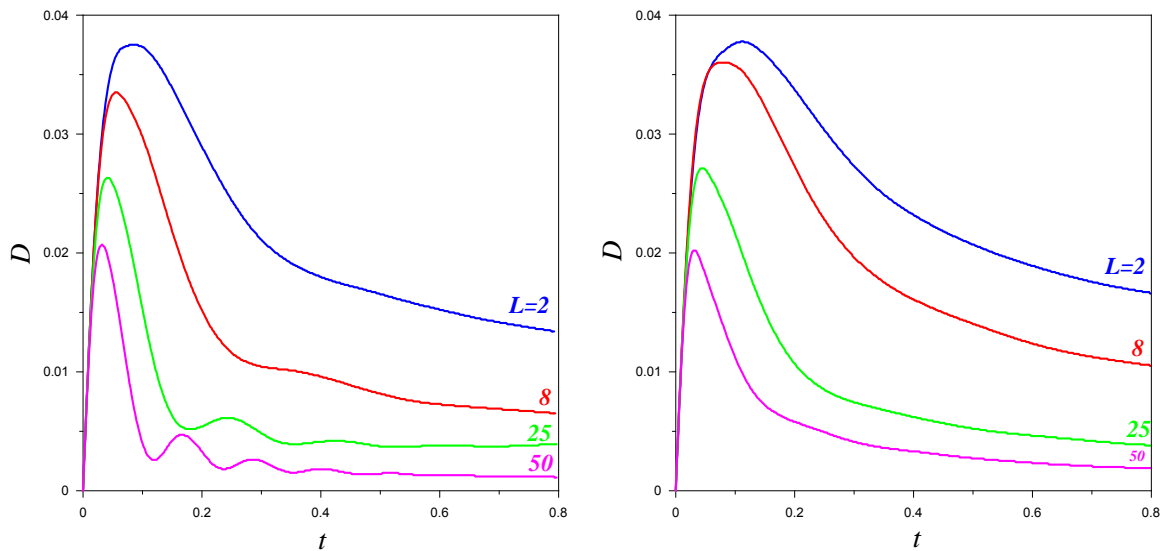


Рисунок 3.6— Часові залежності коефіцієнту дифузії, розраховані за формулою (3.12) Ейнштейна для плівки води з одного (ліворуч) і двох (праворуч) шарів молекул між гладенькими алмазними стінками для різних значень навантаження.

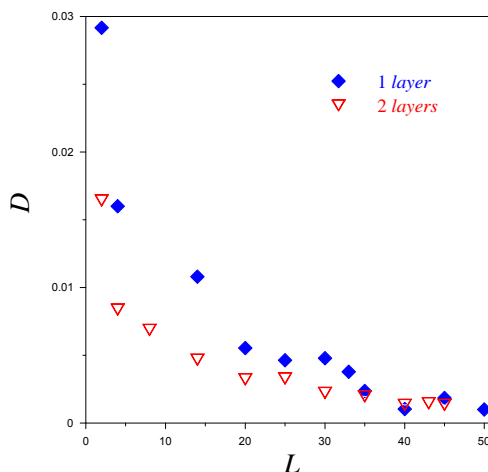


Рисунок 3.7— Залежності коефіцієнту дифузії від навантаження для плівки з одного і двох шарів молекул між гладенькими алмазними пластинами, розраховані із використанням відповідних автокореляційних функцій і формули Гріна - Кубо (3.13).

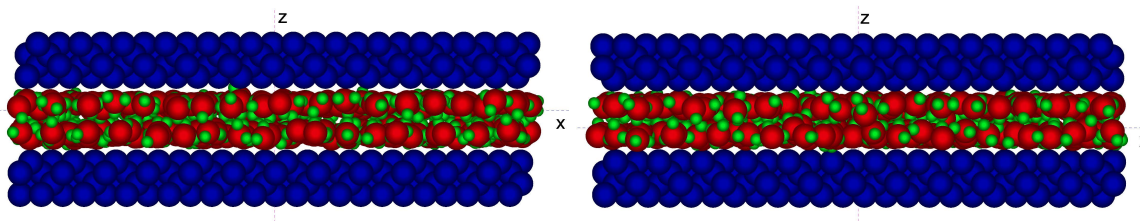


Рисунок 3.8— Організація молекул у шари для значень навантаження 8 (ліворуч) і 14 (праворуч) і нульової сили зсуву.

відних моделювань для різних значень навантаження і зсувної сили. Наявність зсуву, як правило, призводила до появи впорядкованої структури за більш низьких навантажень, ніж за його відсутності. Також зсув сприяв більш швидкому досягненню впорядкованого стану. Таким чином, для двох шарів спостерігається впорядкування молекул зсувом, яке має місце в експериментах [17]. Необхідно відмітити, що для низьких швидкостей зсуву і середніх навантажень молекулярні конфігурації не однозначно визначаються значеннями цих сил. Наприклад, структури на рис. 3.9 для $F_S = 0.5$, $L = 25$ і $F_S = 0$, $L = 30$ не є абсолютно відтворюваними, і в інших серіях моделювань для цих же значень параметрів отримуються невпорядковані конфігурації. Навпаки, за високих тисків завжди спостерігається впорядкований стан, як показано на нижній правій частині рис. 3.9.

Відсутність впорядкування в одношаровій плівці можна пояснити особливостями моделі. Поведінка такої плівки повинна бути схожою на поведінку простої ЛД рідини, стиснутої між гладенькими поверхнями. Це впливає із фактів, що шорсткість поверхонь є малою, і в таких тонких плівках води у напрямі осі z молекули можуть взаємодіяти лише з атомами поверхонь. Останні, у свою чергу, взаємодіють лише з O сайтами молекул і лише через ЛД потенціал. Отже, ЛД внесок переважає у взаємодіях молекул води в одношаровій плівці. Для більш товстої плівки молекули у

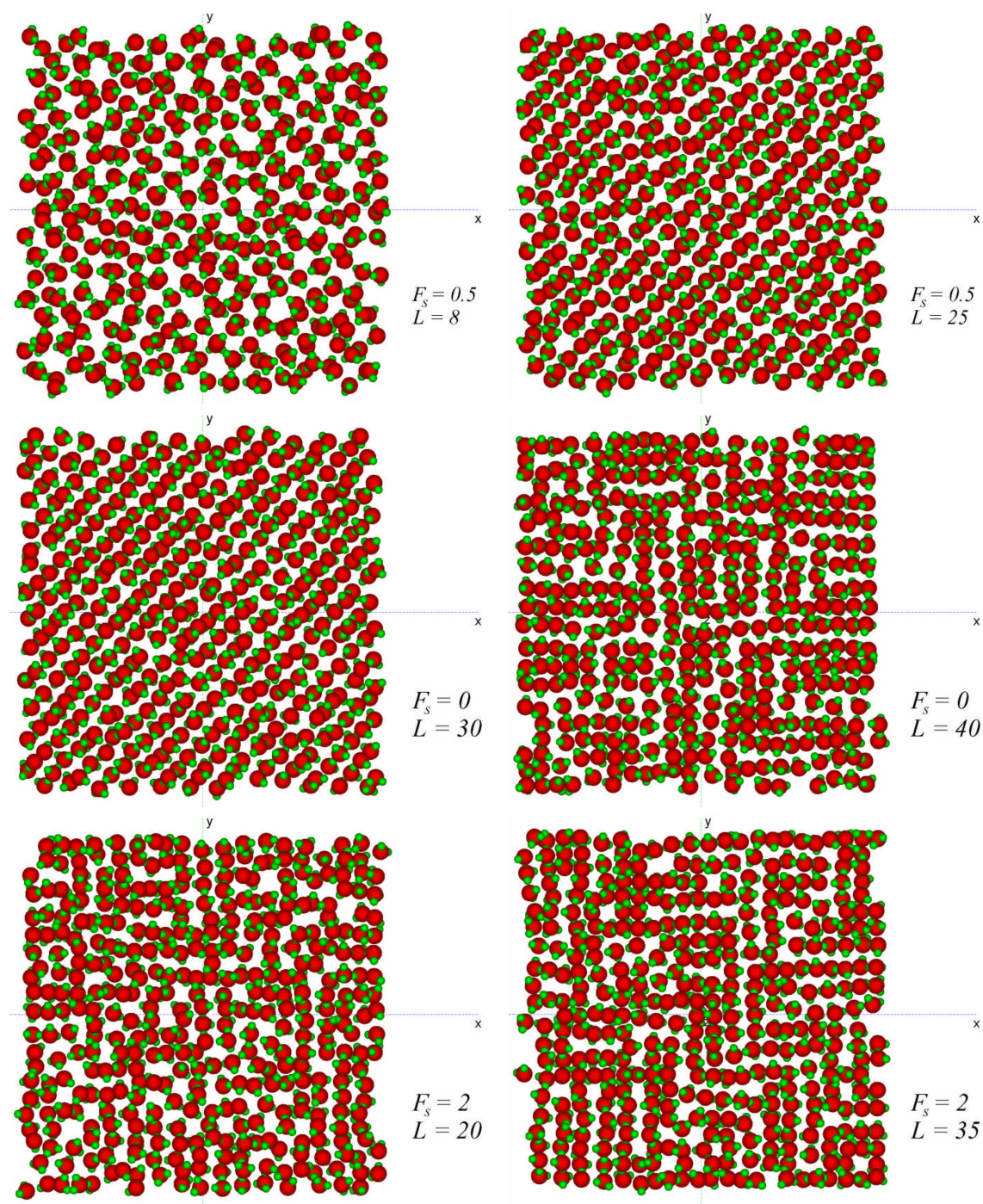


Рисунок 3.9— Конфігурації молекул у площині xy для різних навантажень і зсувних сил у кінці відповідних моделювань для півки товщиною два молекулярні діаметри, стиснутої між атомарно-гладенькими алмазними пластинами.

сусідніх шарах можуть взаємодіяти одна з одною, і кулонівська взаємодія може викликати виникнення впорядкованих структур. Необхідно відмітити, що впорядкування, яке спостерігається, не є істинним термодинамічним фазовим перетворенням, і рідиноподібний та твердоподібний стани не є тотожними рідкій і твердій об'ємним фазам. Більш коректно їх називати статичним і динамічним епітаксійними станами, оскільки вони виникають лише в межових півках, властивості яких визна-

чаються стисканням і епітаксійними взаємодіями між плівкою й атомами поверхонь [17].

Часові залежності сили тертя на рис. 3.10 для одного шару молекул мають нерегулярну форму із значними флуктуаціями. Для плівки товщиною два молекулярні діаметри на цьому ж рисунку за високих зсувних сил спостерігаються періодичні піки, які мають місце в експериментах, коли плівка рідини знаходиться у твердоподібному стані, і які відповідають переривчастому руху [5, 17]. Однак, часовий масштаб у моделюваннях (порядку десятків – сотень пікосекунд) не дозволяє однозначно проводити порівняння із експериментом, у якому час набуває макроскопічних значень порядку секунд.

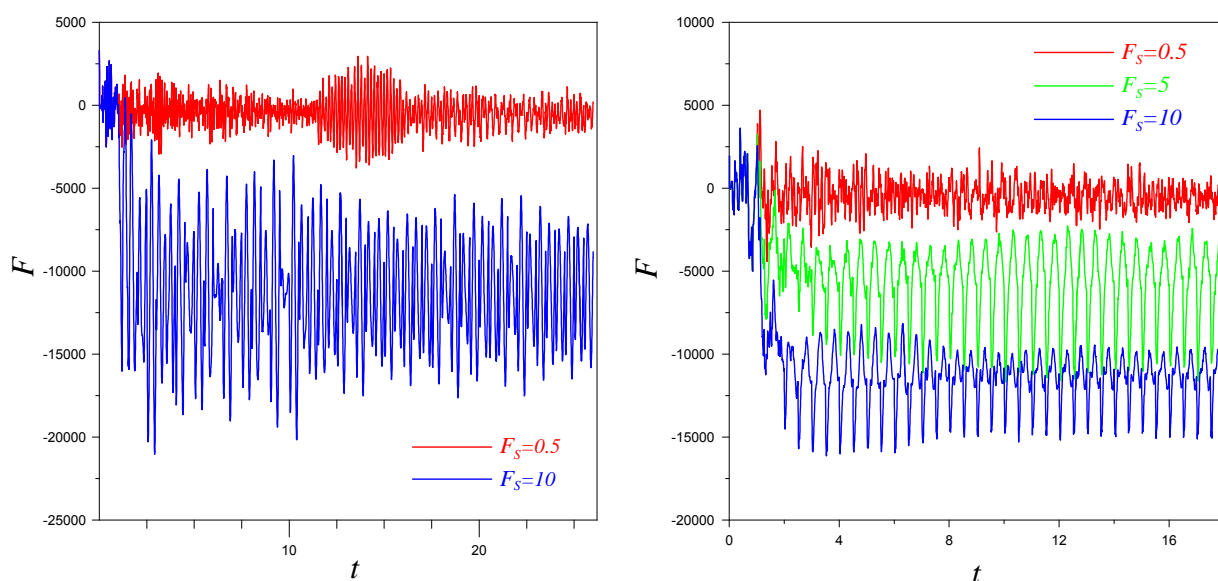


Рисунок 3.10— Часові залежності сили тертя для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри, стиснутих між гладенькими пластинами, і різних зсувних сил. Значення навантаження дорівнює 50. Від’ємний тренд є наслідком факту, що сила тертя діє у напрямі, протилежному напрямку ковзання.

На залежностях середнього за часом значення сили тертя від навантаження, поданих на рис. 3.11, можна виділити дві основні ділянки: лінійну для малих L , що відповідає першому закону Амонтона, і горизонтальну для більш високих навантажень. Дані залежності можна пояснити за допомогою моделі “буливної мостової” [5, 34], згідно із якою сила тертя для межового режиму визначається двома складовими. Перша виникає через наявність внутрішніх адгезійних сил між молекулами плівки і поверхнями, а друга обумовлена дією зовнішнього навантаження. Сила тертя визначається співвідношенням:

$$F = S_c A + CL, \quad (3.15)$$

де сталі S_c і C – критичне зсувне напруження і коефіцієнт тертя, A – площа контакту і L – зовнішнє навантаження. Величина S_c залежить від адгезійних взаємодій плівки із поверхнями. Коефіцієнт тертя C пов’язаний із атомною гранулярністю (шорсткістю) поверхонь і розмірами, формою

і конфігурацією молекул рідини між поверхнями. У загальному випадку, чим більш гладенькими є поверхні, тим меншим повинно бути значення C . Слід відмітити, що макроскопічний коефіцієнт тертя μ для пошкоджених поверхонь має різне походження і величину по відношенню до C .

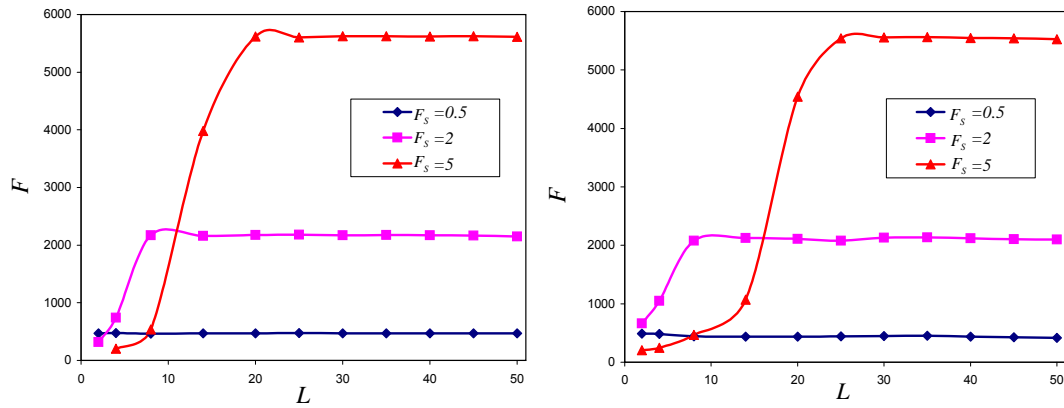


Рисунок 3.11— Залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між гладенькими стінками за різних значень зсувної сили.

Графіки на рис. 3.11 можна пояснити наступним чином. Оскільки поверхні в моделі є абсолютно гладенькими, і молекули мають просту форму, то можна вважати, що в силу тертя дають внесок лише адгезійні взаємодії, тобто $C \approx 0$, і сила тертя визначається першим доданком в (3.15). Спочатку із зростанням навантаження різко збільшується кількість і величина адгезійних зв'язків молекул води із поверхнями, тому на рис. 3.11 спостерігається зростання сили тертя із збільшенням L . Після досягнення деякого значення навантаження для даної величини сили зсуву встановлюються деякі стаціонарні значення кількості адгезійних зв'язків і величини сил адгезії. Оскільки у модель не включені деформації поверхонь, то при збільшенні L площа контакту не змінюється, перший доданок у (3.15) і, відповідно, сила тертя залишаються сталими із збільшенням L . Можна також говорити про аналогічну зміну зсувних напружень $S = F/A$, які часто використовуються в експериментах. Відмітимо, що експерименти із простими сферичними молекулами дають схожі залежності зсувних напружень S від навантаження L [5]. Однак, для реальних поверхонь стає значення S для високих L обумовлене пропорційними змінами F і A внаслідок деформації поверхонь, а в моделюваннях сталість зсувних напружень обумовлена сталістю даних величин.

Таким чином, модель дає результати, які у багатьох відношеннях відповідають поведінці плівок рідин із молекулами сферичної форми. Однак, молекули води не можна віднести до простих сферичних, і, до того ж, для води між атомарно-шорсткими поверхнями в експериментах спостерігається виконання закону Амонтона для широкого діапазону навантажень. Дані розбіжності можна пояснити простотою досліджуваної моделі. У ній не враховуються пружність поверхонь, їх шорсткість, взаємодія однієї з одною (яка відбиває наявність сил гідратації у водних розчинах). Необ-

хідним є врахування взаємодії поверхонь із молекулами води, оскільки моделювання гідрофільних поверхонь ЛД потенціалом є спрощеним. Ці фактори можуть мати значний вплив на поведінку системи і привести до переваги другого доданку в (3.15). У наступному розділі наведено результати для моделі, у якій введено атомарний періодичний рельєф поверхонь.

3.3.2. Плівка води між поверхнями із періодичним атомарним рельєфом

На рис. 3.12 - 3.14 подано результати вимірювань автокореляційної функції швидкості й коефіцієнту дифузії для плівок води, стиснутих між абсолютно жорсткими алмазними стінками із періодичним рельєфом атомарного масштабу. Отримані залежності мають вид, аналогічний до залежностей для системи із гладенькими пластинами, і вказують на наявність твердоподібного стану ультратонкої плівки води.

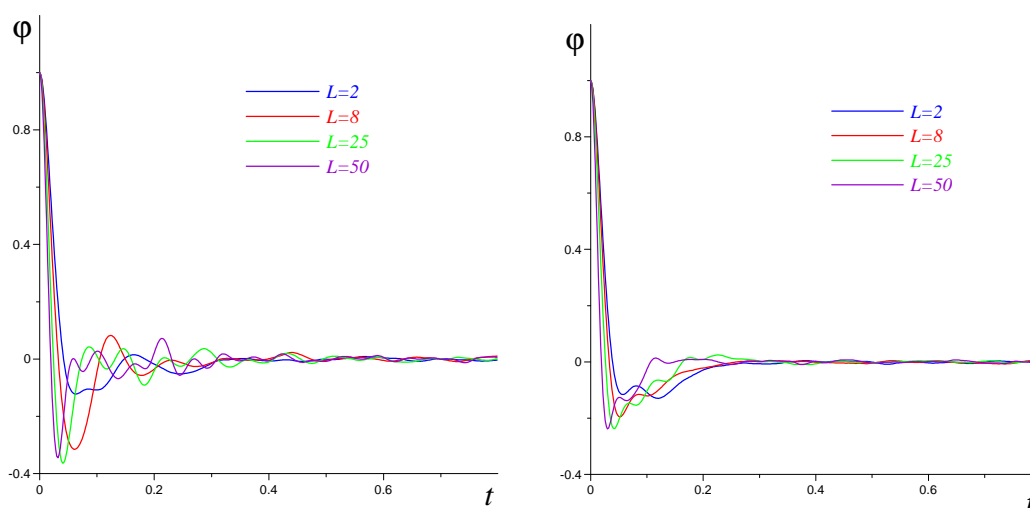


Рисунок 3.12— Часові залежності автокореляційних функцій швидкості (3.14) для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри, стиснутих між алмазними стінками із періодичним рельєфом атомарного масштабу, за різних значень навантаження.

Основною відмінністю поведінки межової плівки води між атомарно-шорсткими поверхнями є вигляд конфігурацій молекул. Так, шари не утворювалися, а мали місце структури, наведені на рис. 3.15. Також на відміну від гладеньких поверхонь за високих навантажень спостерігалось горизонтальне впорядкування для одношарової плівки води (як за відсутності, так і за наявності зсуву), що також мало місце для ЛД рідин між шорсткими поверхнями у комп'ютерних експериментах [5]. На рис. 3.16 подано впорядковані конфігурації молекул у плівці товщиною один молекулярний діаметр.

Горизонтальне впорядкування для плівки води товщиною два молекулярні діаметри між шорсткими поверхнями відсутнє і, отже, не спостерігається впорядкування молекул зсувом. На

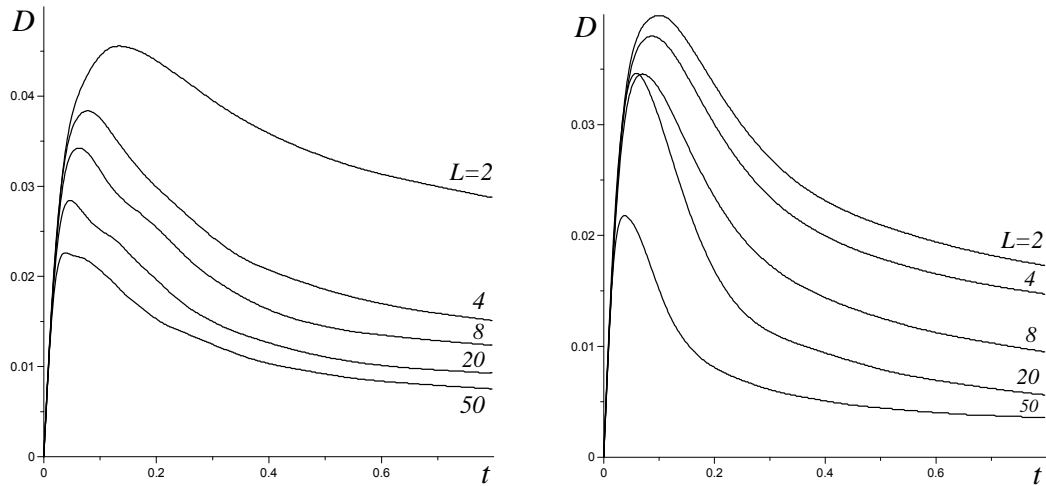


Рисунок 3.13— Часові залежності коефіцієнту дифузії, розраховані за формулою (3.12) Ейнштейна для плівки води з одного (ліворуч) і двох (праворуч) шарів молекул, стиснутих між алмазними стінками із періодичним рельєфом атомарного масштабу, для різних значень навантаження.

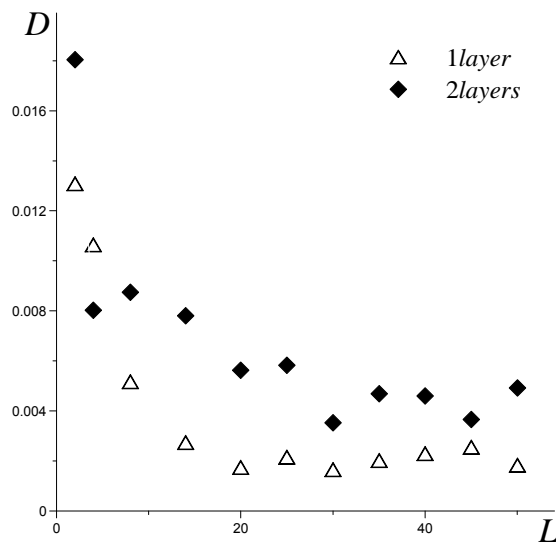


Рисунок 3.14— Залежності коефіцієнту дифузії від навантаження для плівки з одного і двох шарів молекул, стиснутих між алмазними стінками із періодичним рельєфом атомарного масштабу, розраховані із використанням відповідних автокореляційних функцій і формули Гріна - Кубо (3.13).

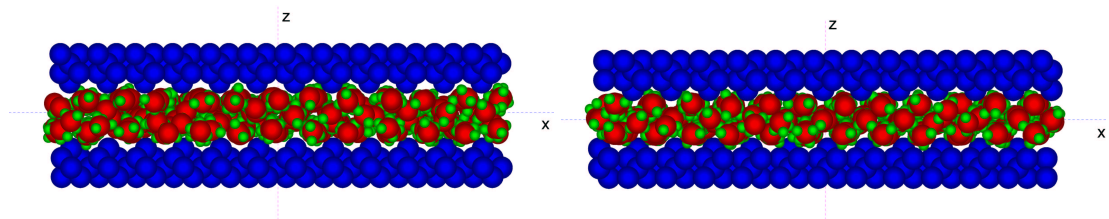


Рисунок 3.15— Типові конфігурації молекул у вертикальному перерізі у плівці води між шорсткими поверхнями для навантажень 8 (ліворуч) і 30 (праворуч) і нульової сили зсуву.

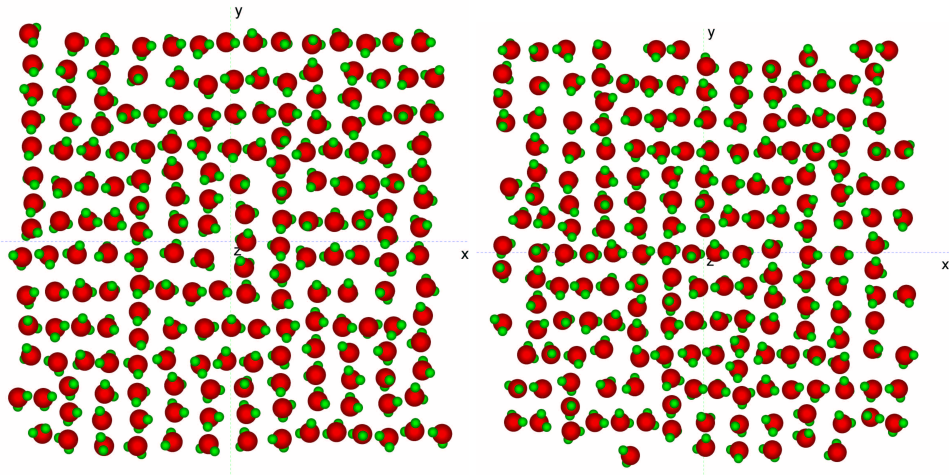


Рисунок 3.16— Конфігурації молекул в площині xy в одношаровій плівці води між шорсткими поверхнями за відсутності зсуву для навантажень 20 (ліворуч) і 40 (праворуч).

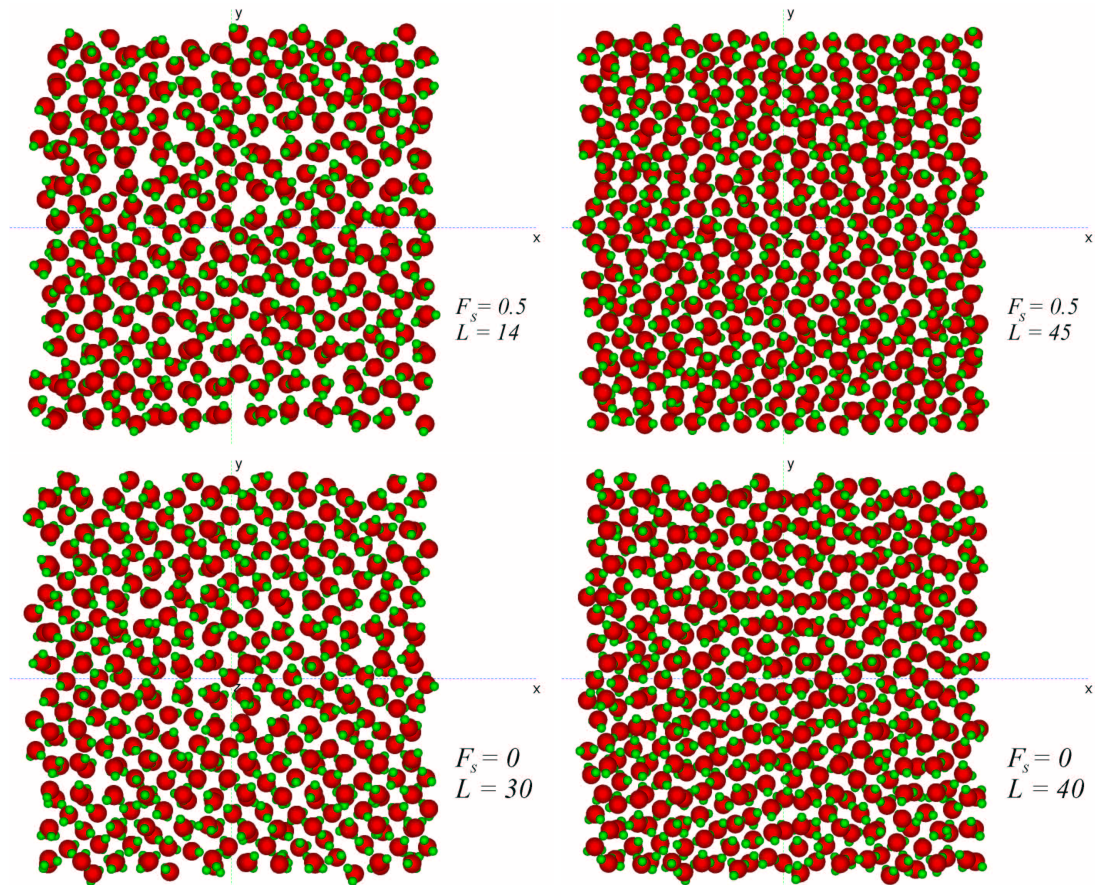


Рисунок 3.17— Конфігурації молекул у площині xy для різних навантажень і зсувних сил у кінці відповідних моделювань для плівки товщиною два молекулярні діаметри, стиснутої між атомарно-шорсткими алмазними пластинами.

рис. 3.17 подано типові конфігурації молекул у горизонтальній площині у плівці товщиною два молекулярні діаметри для різних значень навантажень і зсуву.

Часові залежності сили тертя для шорстких поверхонь аналогічні залежностям для гладеньких стінок і тому не наводяться. На рис. 3.18 подано залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження. Порівняння з рис. 3.11 показує, що періодичний атомарний рельєф не приводить до якісних змін залежностей $F(L)$.

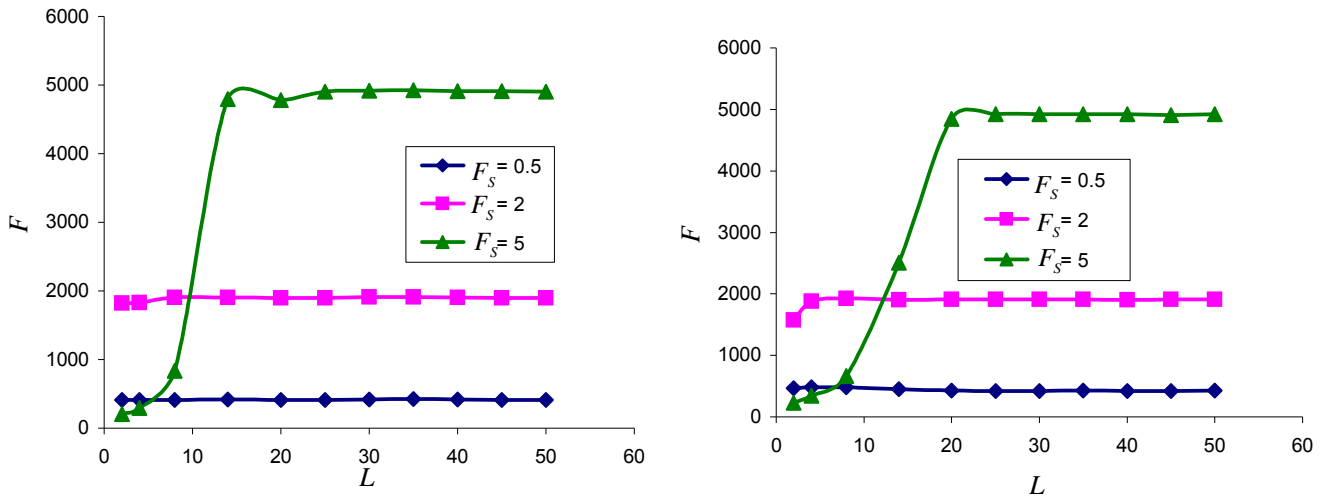


Рисунок 3.18— Залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між шорсткими стінками за різних значень зсувної сили.

Таким чином, як впливає з проведених комп'ютерних експериментів, характер впорядкування молекул води в значній мірі визначається рельєфом алмазних стінок. Для шорстких пластин шари молекул не формуються, площинне впорядкування відсутнє. Періодичний рельєф поверхонь якісно не змінює часові залежності сили тертя, а також залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження.

РОЗДІЛ 4

БАГАТОВИМІРНИЙ ТЕРМОДИНАМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ДЛЯ ОПИСУ ПЛАВЛЕННЯ УЛЬТРАТОНКОЇ ПЛІВКИ МАСТИЛА У НАНОПРИСТРОЯХ

4.1. Основні рівняння

При товщині змащувального матеріалу, меншій за 10 атомарних шарів, виникає режим межового тертя [39]. Експерименти показують, що такий тонкий шар мастила проявляє аномальні властивості в порівнянні з об'ємними рідинами, або із мастилами, товщина яких більше лише у декілька разів [17]. Зокрема, спостерігається властивий сухому тертю переривчастий рух (*stick-slip*) [17, 40]. Такий режим пояснюється як тверднення, що обумовлено стискуванням поверхонь, що труться, і подальше стрибкоподібне плавлення при перевищенні зсувними напруженнями межі текучості ("зсувне плавлення").

Існує декілька феноменологічних моделей, що дозволяють частково пояснити експериментально спостережувані результати. Наприклад, такі як термодинамічні [21], механістична [41] і синергетична [2, 42]. Вони мають як детерміністичну [2, 41], так і стохастичну [43, 44] природу. Дослідження також проводяться за допомогою методів молекулярної динаміки [4, 45]. Виявляється, що мастило може забезпечувати кілька кінетичних режимів, між якими в процесі тертя відбуваються переходи, що приводять до переривчастого руху [17]. У теоретичній роботі [43] знайдено три режими тертя: режим ковзання за малих швидкостях зсуву, регулярний переривчастий режим і режим ковзання за великих швидкостях зсуву. Існування цих режимів підтверджують численні експерименти [17, 39, 40, 46].

У роботах [2, 42] в рамках моделі Лоренца для апроксимації в'язкопружного середовища розвинено підхід, згідно з яким перехід ультратонкої плівки мастила з твердоподібного в рідиноподібний стан відбувається в результаті термодинамічного і зсувного плавлення. Проведено опис цих процесів, що відбуваються в результаті самоорганізації полів зсувних напружень і деформації, а також температури мастила з урахуванням адитивних шумів вказаних величин [47, 48] і корельованих флуктуацій температури [49]. Показано, що у випадку адитивних шумів встановлюється самоподібний режим плавлення мастила, у якому часові ряди напружень набувають мультифрактальних властивостей. Причини стрибкоподібного плавлення і гістерезису, які спостерігалися в експериментах [19, 20, 27], розглянуто в роботах [50–52]. Тут також визначено умови реалізації означених особливостей при врахуванні деформаційного дефекту модуля зсуву. В рамках вказаної моделі

також описано періодичний переривчастий режим тертя, який, проте, має стохастичну складову, і може реалізовуватися тільки за наявності у системі флуктуацій. Ще одним недоліком вказаної моделі є те, що вона не враховує навантаження, яке прикладено до поверхонь тертя і при отриманні основних рівнянь застосовано ряд наближень [2].

У даному розгляді запропоновано термодинамічну теорію, що заснована на розкладанні вільної енергії системи за степенями параметра f , який є надлишковим об'ємом [53, 54], що виникає в результаті формування дефектної структури в мастилi при його плавленні. Рідиноподібний стан інтерпретується як ділянка пластичної течії на діаграмі навантаження і характеризується наявністю в мастилi дефектів [21]. Для опису сильно нерівноважних процесів, що відбуваються при ковзанні двох твердих тіл, що труться та розділені шаром мастила, використовується підхід, заснований на теорії фазових переходів Ландау [55–59]. Метою запропонованого дослідження є виявлення особливостей періодичного режиму переривчастого тертя у рамках механічного еквівалента трибологічної системи, оскільки численні експерименти вказують саме на періодичний характер переривчастого руху [17].

При плавленні мастила товщиною менше ніж 10 молекулярних шарів стаціонарні стани, в яких воно знаходиться, не є термодинамічними фазами, а подають кінетичні режими тертя, яких може бути декілька. При цьому говорять не про тверду і рідку, а про твердоподібну і рідиноподібну фази. Про плавлення таких мастил судять по збільшенню їх об'єму [4] і коефіцієнта дифузії [4, 5, 31, 45]. Оскільки експериментально спостережуваною величиною з зазначених двох є об'єм, для опису стану мастила введемо параметр f , який має фізичний сенс надлишкового об'єму [53, 54], що виникає за рахунок хаотизації структури твердого тіла в процесі плавлення. Із зростанням параметра f росте густина дефектів в мастилi, яке за рахунок їх транспорту, що відбувається під дією прикладеного дотичного напруження, переходить в кінетичний режим пластичної течії (рідиноподібна фаза).

Запишемо розкладання для густини вільної енергії з урахуванням внесків від пружних компонент зсувних деформацій ε_{ij}^e та ентропії s у вигляді

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_0^* + \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2 - \alpha s^2 + \frac{c}{2}(\nabla f)^2 - \\ &- \varphi_0 f + \frac{1}{2}\varphi_1 f^2 - \frac{1}{3}\varphi_2 f^3 + \frac{1}{4}\varphi_3 f^4, \end{aligned} \quad (4.1)$$

де Φ_0^* , λ , μ , α , c , φ_0 , φ_1 , φ_2 , φ_3 – константи розкладання. Причому, у свою чергу,

$$\varphi_0 = \varphi_0^* + \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}(\varepsilon_{ij}^e)^2 + \alpha_\varphi s. \quad (4.2)$$

Пружні напруження враховуються з точністю до квадратичних внесків через інваріанти тензора деформацій ε_{ii}^e , $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e$, де під індексами, що повторюються, мається на увазі підсумовування. При цьому перший інваріант подає слід тензора деформацій $\varepsilon_{ii}^e = \varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e$, а другий визначається виразом [60]

$$(\varepsilon_{ij}^e)^2 \equiv (\varepsilon_{ii}^e)^2 - 2I_2 = (\varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e)^2 -$$

$$-2(\varepsilon_1^e \varepsilon_2^e + \varepsilon_1^e \varepsilon_3^e + \varepsilon_2^e \varepsilon_3^e) = (\varepsilon_1^e)^2 + (\varepsilon_2^e)^2 + (\varepsilon_3^e)^2. \quad (4.3)$$

Згідно з виразом (4.1) в мастилі виникають пружні напруження

$$\sigma_{ij}^e = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} = \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e - (\bar{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e) f. \quad (4.4)$$

Вираз (4.4) можна представити у вигляді ефективного закону Гука

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu_{eff} \varepsilon_{ij}^e + \lambda_{eff} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} \quad (4.5)$$

з ефективними пружними параметрами¹

$$\mu_{eff} = \mu - \bar{\mu} f, \quad (4.6)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda - \bar{\lambda} f, \quad (4.7)$$

які зменшуються з плавленням при зростанні параметра f .

Нескладно показати, що інваріанти визначаються як

$$\varepsilon_{ii}^e = \frac{n}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}}, \quad (4.8)$$

$$(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\tau}{\mu_{eff}} \right)^2 + (\varepsilon_{ii}^e)^2 \right], \quad (4.9)$$

де n , τ – нормальна і дотична (зсувна) компоненти напружень, які діють на мастило з боку поверхонь, що труться². Співвідношення (4.8) та (4.9) подають зв'язок між компонентами тензорів і їх інваріантами лінійної теорії пружності [60].

Запишемо еволюційне рівняння для нерівноважного параметра f у вигляді рівняння Ландау-Халатнікова

$$\tau_f \dot{f} = -\frac{\partial \Phi}{\partial f}, \quad (4.10)$$

де введено час релаксації τ_f . У явному вигляді воно запишеться як

$$\tau_f \frac{\partial f}{\partial t} = -c \nabla^2 f + \varphi_0 - \varphi_1 f + \varphi_2 f^2 - \varphi_3 f^3 - \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda_{eff} + \mu_{eff})^2}, \quad (4.11)$$

де поява останнього доданку пов'язана з тим, що інваріанти (4.8) і (4.9) залежать від величини надлишкового об'єму f .

Температура мастила визначається через вільну енергію системи

$$T = -\frac{\partial \Phi}{\partial s} = 2\alpha s + \alpha_\varphi f. \quad (4.12)$$

¹При $f > \mu/\bar{\mu}$ слід вважати $\mu_{eff} = 0$, а коли $f > \lambda/\bar{\lambda}$, необхідно приймати $\lambda_{eff} = 0$.

²Зсувні напруження τ визначаються із виразу (4.5) при $i \neq j$, тобто при $\delta_{ij} = 0$. У випадку $\mu_{eff} = 0$ доданок τ/μ_{eff} в (4.9) слід замінювати у відповідності з (4.5) на $2\varepsilon_{ij}^e$.

Таким чином, ентропія є функцією температури і надлишкового об'єму. При цьому вільна енергія (4.1) також є функцією температури та об'єму.

Для опису процесів теплообміну мастила з навколишнім середовищем введемо температуру поверхонь тертя T_e [2]. У випадку неоднорідного нагріву середовища рівняння теплопровідності є звичайним рівнянням безперервності [61]

$$T \frac{\partial s}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T, \quad (4.13)$$

де коефіцієнт теплопровідності κ вважається постійним. Для нормальної складової ∇_z^2 з достатньою точністю можна використовувати наближення $\kappa \nabla_z^2 T \approx (\kappa/h^2)(T_e - T)$, де h – товщина мастила. Із врахуванням цього рівняння (4.13) записується у вигляді

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\kappa}{h^2} \left(\frac{T_e}{T} - 1 \right) + \frac{\kappa}{T} \nabla_{xy}^2 T, \quad (4.14)$$

де величина h^2/κ грає роль часу релаксації, протягом якого відбувається вирівнювання температур по товщині мастила за рахунок теплопровідності.

Скористаємося дебаївським наближенням, що зв'яже пружну деформацію ε_{ij}^e з пластичною ε_{ij}^{pl} [21]:

$$\varepsilon_{ij}^{pl} = \frac{\varepsilon_{ij}^e}{\tau_\varepsilon}, \quad (4.15)$$

де τ_ε – максвеллівський час релаксації внутрішніх напружень. Повна деформація в шарі визначається як

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^{pl}. \quad (4.16)$$

Ця деформація задає швидкість руху верхнього блоку V_{ij} згідно з наступним зв'язком [23]:

$$V_{ij} = h \dot{\varepsilon}_{ij} = h(\dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^{pl}). \quad (4.17)$$

З трьох останніх співвідношень слідує вираз для пружної компоненти зсувної деформації:

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon}_{ij}^e = -\varepsilon_{ij}^e + \frac{V_{ij} \tau_\varepsilon}{h}. \quad (4.18)$$

Далі, в рамках цієї роботи, для спрощення розглядається однорідна система, і в співвідношеннях (4.1), (4.11), (4.14) вважається $\nabla \equiv 0$.

4.2. Сила тертя

Система кінетичних рівнянь (4.11), (4.14), (4.18) з урахуванням визначень (4.2), (4.5) – (4.9), (4.12) є замкненою і може бути використана для дослідження кінетики процесу плавлення. У даному розділі розглянемо стаціонарні режими тертя. Відповідно до рівнянь (4.14) і (4.18) з часом

встановлюються стаціонарні значення температури мастила T_0 і пружної компоненти зсувної деформації ε_{ij0}^e :

$$T_0 = T_e, \quad \varepsilon_{ij0}^e = \frac{V_{ij}\tau_\varepsilon}{h}. \quad (4.19)$$

Для знаходження стаціонарних станів всіх величин необхідно чисельно розв'язати еволюційне рівняння (4.11), використовуючи (4.2), (4.5) – (4.9) і визначаючи поточну ентропію з (4.12) при $T = T_e$, а значення деформації з (4.19).

У експериментальних роботах часто наводяться залежності сили тертя від швидкості зсуву, товщини шарів мастил, нормального тиску [17, 19, 20, 27, 39, 40]. В цьому розділі проаналізуємо вплив на силу тертя температури мастила і швидкості зсуву.

У мастилі, окрім пружних σ_{ij}^e , виникають також і в'язкі σ_{ij}^{visc} напруження. Повне напруження в шарі є сумою цих двох внесків

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^e + \sigma_{ij}^{visc}. \quad (4.20)$$

Повна сила тертя визначається стандартним чином:

$$F_{ij} = \sigma_{ij}A, \quad (4.21)$$

де A – площа контактуючих поверхонь. В'язкі напруження в шарі подаються формулою [23]

$$\sigma_{ij}^{visc} = \frac{\eta_{eff}V_{ij}}{h}, \quad (4.22)$$

де η_{eff} – ефективна в'язкість, яка знаходиться тільки експериментально і в межевому режимі [23, 62]

$$\eta_{eff} \sim (\dot{\varepsilon}_{ij})^\gamma, \quad (4.23)$$

де $\gamma < 0$ для псевдопластичних мастил та $\gamma > 0$ для ділатантних [62]. З урахуванням (4.17), (4.23) вираз для в'язких напружень (4.22) запишеться у вигляді:

$$\sigma_{ij}^{visc} = \left(\frac{V_{ij}}{h}\right)^{\gamma+1}. \quad (4.24)$$

Після підстановки (4.20) і (4.24) в (4.21) маємо шуканий вираз для сили тертя³:

$$F_{ij} = \left[\sigma_{ij}^e + \operatorname{sgn}(V_{ij}) \left(\frac{|V_{ij}|}{h}\right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (4.25)$$

де σ_{ij}^e задається формулою (4.5) при $i \neq j$.

В експериментах у якості поверхонь тертя зазвичай використовуються атомарно-гладкі поверхні слюди, а в ролі мастила – квазісферичні молекули октаметілциклотетрасілоксана (ОМЦТС)

³Тут введено знакову функцію $\operatorname{sgn}(x)$ і абсолютне значення швидкості зсуву $|V_{ij}|$, оскільки вона може приймати також і від'ємні значення.

і лінійні ланцюгові молекули тетрадекана, або гексадекана [17, 19]. Вказані експерименти проводяться за наступних умов: товщина мастила $h \sim 10^{-9}$ м, площа контакту $A \sim 3 \cdot 10^{-9}$ м², навантаження на верхню поверхню тертя $L = (2 \div 60) \cdot 10^{-3}$ Н, що відповідає нормальним напруженням $n = -L/A = -(6.67 \div 200) \cdot 10^5$ Па. Сила тертя при цьому складає $F \sim (2 \div 40) \cdot 10^{-3}$ Н. В межах зазначених експериментальних робіт виявлено, що мастило плавиться при перевищенні критичного значення температури $T_e > T_0 \sim 300$ К або при швидкості зсуву $V > V_c \sim 400$ нм/с. Ці значення можуть істотно змінюватися залежно від типу мастила і геометрії експерименту.

У даній моделі, відповідно до експериментальних даних, обираються наступні значення констант теорії: $\Phi_0^* = 20$ Дж/м³, $\lambda = 2 \cdot 10^{11}$ Па, $\bar{\lambda} = 10^8$ Па, $\mu = 4.1 \cdot 10^{11}$ Па, $\bar{\mu} = 4 \cdot 10^{11}$ Па, $\varphi_0^* = 5$ Дж/м³, $\varphi_1 = 1100$ Дж/м³, $\varphi_2 = 2700$ Дж/м³, $\varphi_3 = 2070$ Дж/м³, $\alpha = 0.055$ К²·м³/Дж, $\alpha_\varphi = 0.05$ К, $h = 10^{-9}$ м, $\tau_f = 1$ Па·с, $\tau_e = 10^{-8}$ с. Зазначимо, що час релаксації надлишкового об'єму τ_f має розмірність в'язкості. Фактично це означає, що із зростанням ефективної в'язкості мастила час встановлення стаціонарного режиму тертя збільшується.

Залежність (4.25) показана на рис. 1. Рисунок 1а ілюструє той факт, що із підвищенням

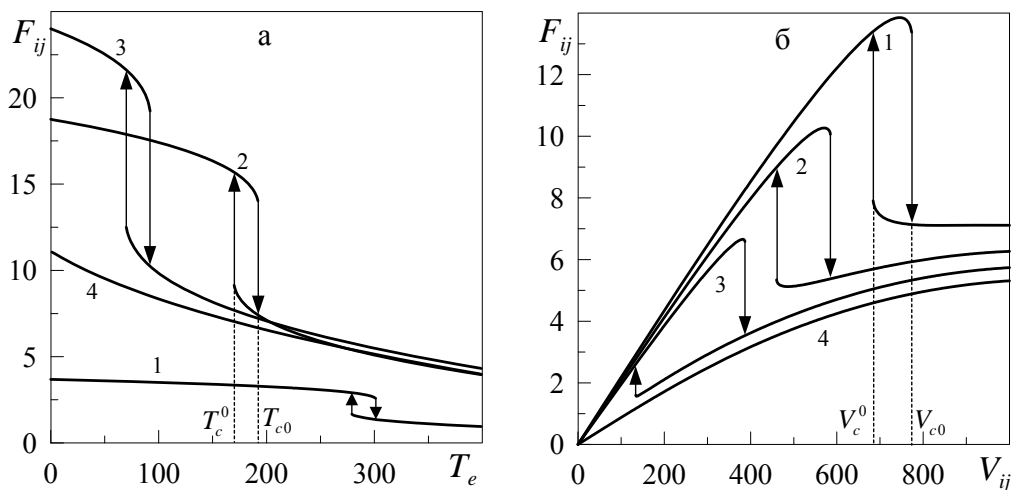


Рисунок 4.1— Залежність стаціонарного значення повної сили тертя F_{ij} (мН) (4.25) від температури поверхонь тертя T_e (К) і швидкості зсуву V_{ij} (нм/с) при $\gamma = 2/3$, $A = 3 \cdot 10^{-9}$ м², $n = -7 \cdot 10^5$ Па: а — криві 1–4 відповідають постійним значенням швидкості зсуву $V_{ij} = 150$ нм/с, 800 нм/с, 1100 нм/с, 1400 нм/с; б — криві 1–4 відповідають фіксованим значенням температури $T_e = 200$ К, 245 К, 279 К, 310 К.

температури сила тертя зменшується. Розглянемо детальніше криву 2. Спершу при підвищенні температури надлишковий об'єм монотонно зростає. При цьому ефективний модуль зсуву $2\mu_{eff}$ (4.6) зменшується, що приводить до зниження значення пружної компоненти зсувних напружень (4.5) і, відповідно, до зменшення значення сили тертя (4.25). При перевищенні температурою критичного значення $T_e > T_{c0}$, величина надлишкового об'єму f стрибкоподібно збільшується і мастило плавиться, що приводить до різкого зниження повної сили тертя. З подальшим пониженням температури

мастило твердне тепер уже при її меншому значенні $T_e = T_c^0$. При цьому залежність має гістерезисний характер, що відповідає фазовим переходам першого роду. Згідно з рисунком 1а з підвищенням швидкості зсуву мастило плавиться при меншому значенні температури. При швидкості вищій за деяке критичне значення мастило незалежно від температури завжди рідиноподібне (крива 4), і сила тертя зменшується разом з температурою за рахунок зменшення модуля зсуву (розрідження мастила).

Таким чином, при малих температурах ($T_e < T_c^0$) реалізується один мінімум потенціалу $\Phi(f)$, який відповідає стаціонарному стану з малим значенням f (твердоподібне мастило). В області температур $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ співіснують два мінімуми $\Phi(f)$. Проте система не може перейти у стан, що відповідає другому мінімуму, оскільки ці мінімуми розділяє максимум енергії. При подальшому збільшенні температури $T_e > T_{c0}$ розмежовуючий максимум зникає, і мастило за механізмом фазового перетворення першого роду переходить в стан, що відповідає єдиному мінімуму при великому значенні f , тобто плавиться. Якщо після цього знижувати температуру, то з появою першого мінімуму система знову не зможе перейти у відповідаючий йому стан із-за наявності розмежовуючого максимуму. З його зникненням при $T_e = T_c^0$ мастило стрибкоподібно твердне.

Рис. 1б демонструє декілька іншу поведінку. Тут, згідно з (4.25), за малих швидкостей зсуву мастило твердоподібне, і відповідне значення σ_{ij}^e велике. Підвищення швидкості в такому режимі приводить до зростання обох компонент сили тертя (4.25) і тому вона швидко збільшується. При подальшому підвищенні швидкості мастило плавиться і пружне зсувне напруження (4.5) істотно зменшується, що, в свою чергу, приводить до різкого зниження повної сили тертя. З подальшим збільшенням швидкості значення F_{ij} зростає за рахунок обох компонент сили тертя, які ростуть із швидкістю зсуву. Згідно з кривою 4 в рідиноподібному стані сила тертя (4.25) також зростає за рахунок збільшення швидкості. Тобто реалізується ситуація, схожа з поведінкою системи при підвищенні температури (рис. 1а), з тією відмінністю, що у разі зсувного плавлення із збільшенням температури поверхонь тертя зростає площа фігури, яку обмежує гістерезис. З підвищенням температури мастило плавиться при менших швидкостях зсуву. Зазначимо, що результати, які подано на рис. 1б, якісно збігаються з новою картою тертя для межового режиму, запропонованою в роботі [23] в результаті узагальнення експериментальних даних. Залежності сили тертя від температури, типу поданих на рис. 1а, в даний час експериментально не вимірюються.

4.3. Трибологічна система

Подані на рис. 1 залежності отримано за фіксованої швидкості зсуву верхньої поверхні тертя. Проте динамічні характеристики трибологічної системи визначаються не тільки силою тертя,

наведеною на вказаному рисунку, а також і властивостями системи в цілому. Зокрема, згідно з експериментами, в області гістерезису залежності на рис. 1 можлива реалізація переривчастого режиму тертя (*stick – slip*) [4, 5, 17, 19, 23, 41, 43, 44], з'ясуванню особливостей якого присвячено цю роботу. Типова схема трибологічної системи подана на рис. 2. На схемі пружину із жорсткістю k

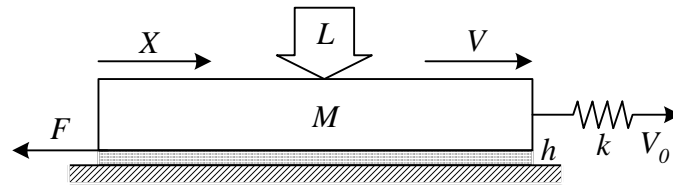


Рисунок 4.2— Схема трибологічної системи.

пов'язано з блоком масою M , до якого прикладено додаткове навантаження L . Блок розташований на гладкій поверхні, від якої відокремлений шаром мастила товщиною h . Вільний кінець пружини приводиться в рух з постійною швидкістю V_0 . При русі блоку виникає сила тертя F (4.25), що чинить опір його пересуванню. Для ультратонких шарів змащувальних матеріалів в режимі межового тертя швидкості блоку V і пружини V_0 можуть не збігатися із-за осцилюючого характеру сили F , що приводить до переривчастого руху блоку. Даний режим нагадує сухе тертя без мастила.

Рівняння руху верхнього блоку має вигляд [17, 21, 41]⁴

$$M\ddot{X} = k \left(\int_0^t V_0 dt' - X \right) - F, \quad (4.26)$$

де $t = t'$ – час руху. У випадку постійного значення швидкості зсуву V_0 інтеграл у (4.26) звичайно можна замінити виразом $V_0 t$. Для обчислення часової еволюції сили тертя останнє рівняння необхідно розв'язувати спільно з (4.11), (4.14), (4.18), визначаючи при цьому силу тертя з (4.25). Проте, часи релаксації деформації τ_ε і ентропії $\tau_s = h^2/\kappa$ за рахунок тонкості мастила, можна покласти малими в порівнянні з часом релаксації надлишкового об'єму τ_f . Тому, в межах наближення $\tau_f \gg \tau_\varepsilon, \tau_s$, розв'язуватимемо спільно два рівняння (4.26), (4.11), визначаючи температуру і деформацію з (4.19), а ентропію з (4.12).

Результат розв'язку вказаних рівнянь наведений на рис. 3. Згідно з останнім сила тертя спочатку монотонно зростає, оскільки мастило твердоподібне, а швидкість зсуву збільшується. Коли вона перевищує критичне значення V_{c0} , мастило плавиться, за рахунок чого зменшується сила тертя, росте швидкість руху верхнього блоку V і він швидко переміщується на велику відстань. При цьому зменшується натягнення пружини і, відповідно, швидкість зсуву. Коли вона стає меншою за значення, що необхідне для підтримки мастила в рідиноподібному стані, останнє твердне, і сила тертя починає зростати. Описаний процес періодично повторюється у часі. Зазначимо, що швидкість,

⁴Оскільки розглядається зсув в одному напрямі, далі для зручності запису опускатимемо тензорні позначення.

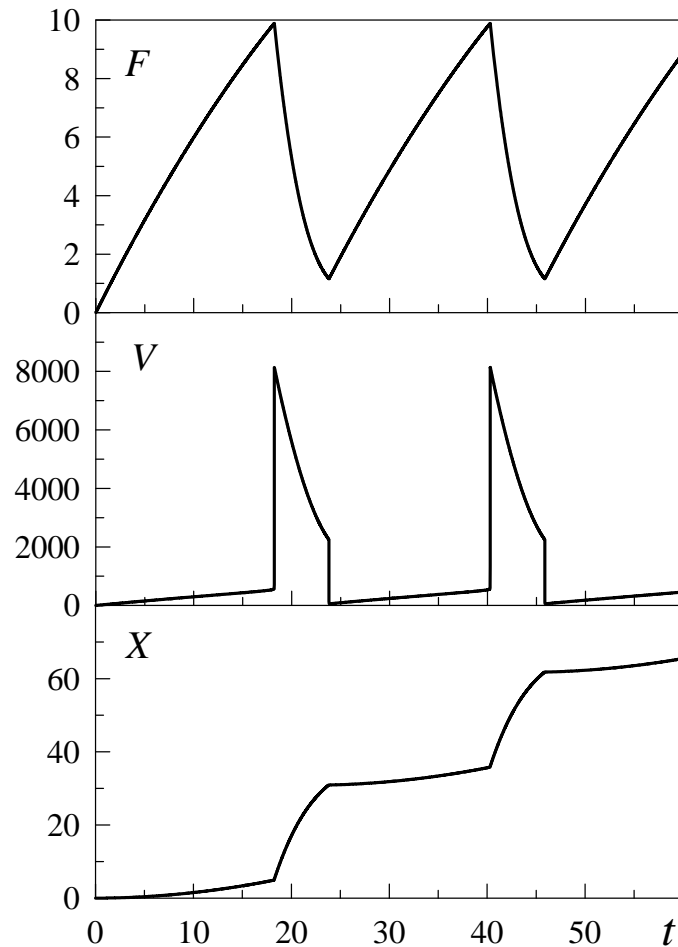


Рисунок 4.3— Залежність сили тертя F (мН), швидкості зсуву поверхні тертя V (нм/с) та її координати X (мкм) від часу t (с) при параметрах $n = -7 \cdot 10^5$ Па, $M = 0.4$ кг, $k = 480$ Н/м, $T_e = 250$ К, $V_0 = 1400$ нм/с.

при якій мастило твердне, не збігається з аналогічною швидкістю, наведеною на рис. 1. Це пов'язано з різким збільшенням швидкості зсуву V при плавленні і відповідним збільшенням параметра f . Згідно з (4.6) модуль зсуву при цьому стає менше нуля і його необхідно вважати за нульовий, що змінює вид потенціалу (4.1). При цьому за наявності пружних деформацій (4.18) пружні напруження в мастилі згідно з (4.5) стають нульовими, що і обумовлює зниження сили тертя, а мастило при цьому тече.

На рис. 4 показано залежність повної сили тертя F (4.25), надлишкового об'єму f і пружної компоненти зсувних напружень σ_{ij}^e (4.5) від часу при збільшенні швидкості зсуву V_0 . Спочатку рух верхнього зрушуваного блоку ($V_0 = V_{01}$) приводить до зростання надлишкового об'єму f . Коли f досягає критичного значення, мастило плавиться за механізмом фазового перетворення першого роду, при цьому параметр f стрибкоподібно збільшується. Мастило після цього знову починає тверднути, оскільки зменшується відносна швидкість зсуву поверхонь тертя (див. рис. 3). Після повного тверднення в ньому з'являється пружне напруження, подальше зростання якого зно-

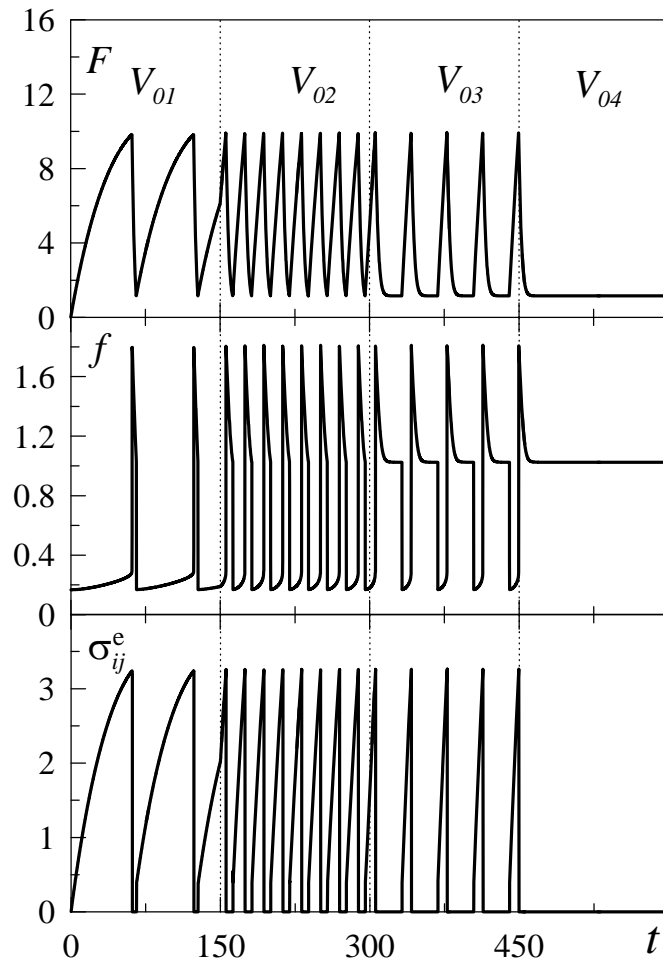


Рисунок 4.4— Залежність сили тертя F (мН), надлишкового об'єму f і пружної компоненти напружень σ_{ij}^e (МПа) від часу t (с) при параметрах рис. 3 і швидкостях зсуву $V_{01} = 650$ нм/с, $V_{02} = 1800$ нм/с, $V_{03} = 2246.7$ нм/с, $V_{04} = 2247$ нм/с.

ву приводить до збільшення параметра f , поки той досягне критичного значення, необхідного для плавлення, і процес повторюється знову. В результаті встановлюється періодичний переривчастий (*stick-slip*) режим плавлення/тверднення. При підвищенні швидкості до значення $V_0 = V_{02}$ частота *stick-slip* піків збільшується за рахунок того, що при цій швидкості у системі швидше встановлюється критичне значення f . Відповідно, мастило швидше плавиться, а тому за один і той же проміжок часу система встигає зробити більшу кількість переходів плавлення/тверднення. З подальшим збільшенням швидкості $V_0 = V_{03}$ частота *stick-slip* піків знову зменшується. Це відбувається за рахунок того, що на залежності $F(t)$ з'являються довгі кінетичні ділянки $F = \text{const}$. Слід зазначити, що в цьому режимі параметр f при плавленні спочатку різко зростає завдяки швидкому збільшенню швидкості зсуву верхнього блоку V . Стаціонарній кінетичній ділянці відповідає менше значення надлишкового об'єму f , що встановлюється після різкого початкового зсуву верхньої поверхні, що треться, за рахунок вивільнення частини механічної потенціальної енергії розтиснутої пружини. При подальшому зростанні швидкості $V_0 = V_{04}$ переривчастий режим зникає і встановлюється кінети-

чний режим тертя рідиноподібного мастила, що характеризується більшим значенням надлишкового об'єму f і нульовими пружними зсувними напруженнями σ_{ij}^e . Зазначимо, що рідиноподібний стан не завжди характеризується нульовим значенням напружень σ_{ij}^e , і в даному випадку цей факт обумовлений рівністю ефективного модуля зсуву мастила (4.6) нулю в рідиноподібному стані [21]. Таким чином, при збільшенні швидкості частота *stick – slip* піків спочатку збільшується, а потім зменшується за рахунок появи довгих кінетичних ділянок. При перевищенні критичного значення швидкості V_0 режим *stick – slip* зникає. Описана поведінка добре узгоджується з експериментальними даними [17].

У експериментах також часто досліджується вплив на характер плавлення мастила зовнішнього нормального тиску, що прикладений до поверхонь тертя [5, 17]. Такі експерименти показують, що тиск впливає на параметри трибологічної системи нетривіальним чином. Наприклад, для мастил з ланцюгових молекул гексадекана із зростанням тиску критична швидкість зсуву зменшується, а для квазісферичних молекул ОМЦТС вона, навпаки, збільшується [17]. Тиск також впливає на частоту і амплітуду *stick – slip* переходів [17]. В межах нашої моделі згідно з рівнянням (4.11) зростання навантаження на поверхні тертя приводить до зменшення надлишкового об'єму, що повинно сприяти твердненню мастила.

На рис. 5 подано часову залежність сили тертя при різних значеннях нормального тиску, дію якого направлено на стиснення поверхонь тертя. При температурі, нижчій за критичне значення

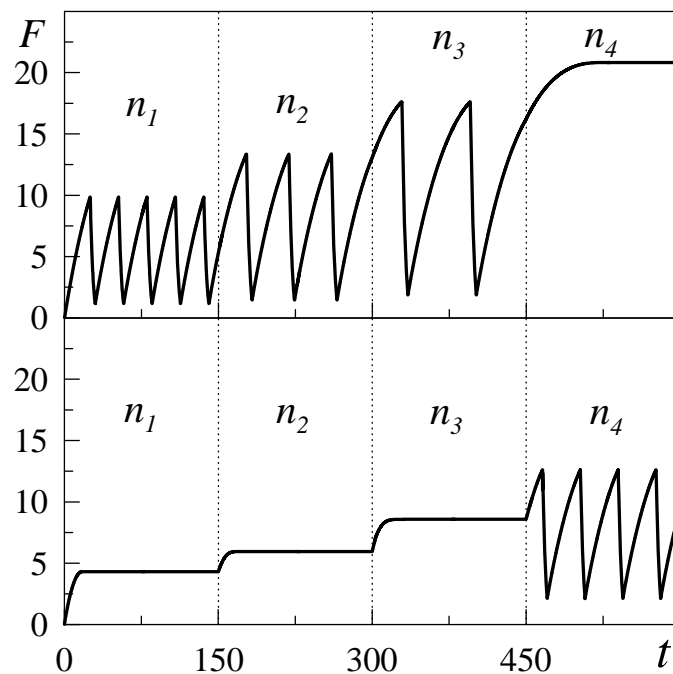


Рисунок 4.5— Залежність сили тертя F (мН) від часу t (с) при параметрах рис. 3 і зовнішньому нормальному навантаженні $n_1 = -7 \cdot 10^5$ Па, $n_2 = -50 \cdot 10^5$ Па, $n_3 = -80 \cdot 10^5$ Па, $n_4 = -100 \cdot 10^5$ Па. Верхня панель відповідає температурі $T_e = 250$ К, нижня — $T_e = 400$ К.

(верхня панель рисунка), реалізується переривчастий режим тертя. Причому, із зростанням тиску збільшується амплітуда *stick – slip* переходів та значення кінетичної і статичної сил тертя, а також зменшується частота переходів. При тиску, що відповідає нормальному напруженню $n = n_4$, *stick – slip* режим не реалізується. Проте, при цьому встановлюється не кінетичний режим, що відповідає рідиноподібному мастилу, а відбувається тверднення мастила унаслідок стиснення стінок. За рахунок цього мастило вже не може розплавитися, тому встановлюється велике значення сили тертя F , що відповідає твердоподібному мастилу і малому значенню надлишкового об'єму f , оскільки стиснення стінок сприяє виникненню в мастилі дальнього порядку чергування атомів. На нижній панелі рисунка подано залежність, яка має місце при підвищеній температурі поверхонь тертя T_e . Тут видно, що встановлюється кінетичний режим тертя, який відповідає малому значенню сили тертя і великому значенню надлишкового об'єму f . Проте, при $n = n_4$ настає *stick – slip* режим, оскільки при такому значенні нормального напруження n згідно з рівнянням (4.11) мастило вже не може бути завжди рідиноподібним. З подальшим зростанням тиску слід чекати повного тверднення мастила, як на верхній панелі рисунка при $n = n_4$. Таким чином, виявлено три режими тертя: 1) кінетичний режим, в якому мастило завжди рідиноподібне; 2) переривчастий режим, що відповідає періодичному плавленню/твердненню; 3) режим сухого тертя, що характеризується великим значенням сили тертя і твердоподібною структурою мастила. Ці режими знайдено також в роботі [43] в рамках стохастичної моделі.

На рис. 6 подано залежність сили тертя від часу при підвищенні температури поверхонь тертя, яка в даному розгляді збігається з температурою мастила. Видно, що підвищення температури

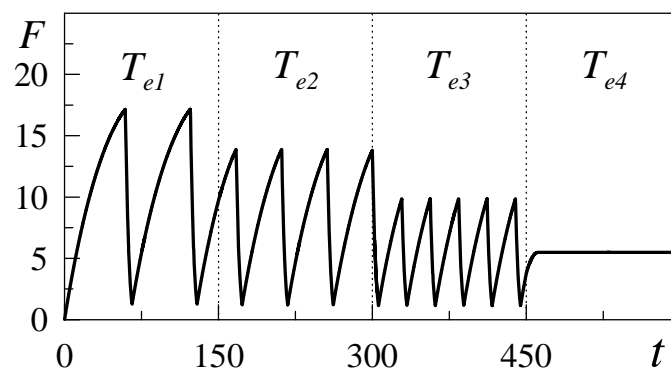


Рисунок 4.6— Залежність сили тертя F (мН) від часу t (с) при параметрах рис. 3 і температурі поверхонь тертя $T_{e1} = 150$ К, $T_{e2} = 200$ К, $T_{e3} = 250$ К, $T_{e4} = 300$ К.

приводить до зниження амплітуди коливань сили тертя і збільшення частоти фазових переходів рідиноподібне – твердоподібне мастило. При $T_e = T_{e4}$ настає режим ковзання, що характеризується постійним значенням кінетичної сили тертя і незмінною швидкістю зсуву верхнього блоку. Таким чином, підвищення температури сприяє плавленню мастила. Дана залежність є прогнозуючою, оскільки експерименти з подібним дослідженням впливу температури нам невідомі.

ВИСНОВКИ

В результаті проведеного дослідження були виявлені причини, що приводять до переривчастого режиму тертя який є основною причиною руйнування деталей, що труться, в нанопристроях. Результати роботи дозволяють розширити уявлення про фізику тертя об'єктів нанорозмірів, коли звичайні закони не виконуються.

Головні результати можна подати наступними висновками (по розділах):

1. Проведено дослідження впливу корельованих флуктуацій температури мастила, які описуються процесом Орнштейна-Уленбека, на характер її плавлення. Ці флуктуації представляють кольоровий шум що характеризується інтенсивністю I і часом кореляції τ_λ . Розглянута поведінка найбільш ймовірного значення зсувних напружень, і побудовані фазові діаграми як у разі переходу другого роду — плавлення аморфного мастила, так і під час переходу першого роду — плавлення кристалічного мастила.

Показано, що у разі безперервного перетворення при малих інтенсивностях I перехід до рідинного режиму тертя відбувається, минуючи область переривчастого тертя, тобто має характер переходу другого роду — плавлення аморфного мастила. У зворотному випадку великих I реалізується перехід першого роду, відповідаючий плавленню кристалічного мастила.

При врахуванні деформаційного дефекту модуля зсуву показано, що зміна значення I інтенсивності флуктуацій температури поверхонь, що труться, може перевести систему з режиму сухого тертя до рідинного, при цьому останній виникає при двох значеннях зсувних напружень. Відповідно на фазовій діаграмі з'являються області, де переривчастий (*stick – slip*) режим тертя характеризується наявністю метастабільного рідиноподібного стану мастила, а також можуть відбуватися переходи між метастабільним і стійким рідкими станами мастила.

Розглянутий самоподібний режим тертя і з'ясовано, що при цьому твердоподібному стану мастила відповідає ненульовий максимум функції розподілу при $\sigma_0 \approx 0$. За наявності деформаційного дефекту модуля зсуву можливо виникнення переривчастого руху, що характеризується спонтанними переходами між трьома стаціонарними значеннями зсувних напружень, при якій реалізується сухе, метастабільне і стійке рідинне тертя.

З'ясовано, що кольоровий шум приводить до степеневого виду розподілу напружень в області їх малих значень навіть при низьких температурах поверхонь тертя, що відповідають сухому тертю. Це означає, що кореляції флуктуацій приводять до виникнення самоподібного режиму поведінки твердоподібного мастила.

2. Проведено врахування деформаційного дефекту модуля зсуву плівки мастила, яке дозволяє представити фазовий перехід першого роду, що відповідає плавленню кристалічного мастила.

При цьому рідиноподібний і твердоподібний стани розділені потенційним бар'єром, і вони є метастабільними фазами, які можуть співіснувати. За відсутності потенційного бар'єру реалізується фазовий перехід другого роду, що відповідає безперервному плавленню аморфного мастила.

Показано, що може реалізуватися як стрибкоподібне плавлення мастила, коли внутрішні зсувні напруження перевищують певне критичне значення, так і безперервне плавлення. Згідно із залежністю стаціонарних напружень від температури поверхонь тертя, існують три режими поведінки мастила. Перший відповідає нульовим зсувним напруженням і деформації, другий – гуківській ділянці діаграми навантаження, і третій – ділянці пластичної течії. Стрибкоподібне плавлення характеризується гістерезисом залежностей стаціонарних напружень від деформації і температури поверхонь тертя, який спостерігається в експериментах. Знайдено параметри системи, при яких реалізується гістерезисна поведінка.

Методом фазової площини проаналізовано еволюцію напружень і деформації, а також швидкості зміни напружень. Знайдено режим, в якому стійкі стаціонарні стани мастила досягаються в результаті релаксаційних коливань, які представляють переривчасте тертя. До твердоподібного стану система повільно релаксує по гуківській ділянці, до рідиноподібного – по пластичній.

3. Методом молекулярної динаміки досліджено поведінку межової плівки води, молекули якої представлені моделлю TIP4P, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями. Вивчено рівноважні й динамічні характеристики системи в залежності від зовнішнього навантаження, зсувної сили, товщини плівки і рельєфу поверхонь.

Результати проведених комп'ютерних експериментів указують на перехід ультратонкої плівки води до твердоподібного стану із збільшенням зовнішнього навантаження. Це виявляється у зменшенні коефіцієнту дифузії й утворенні молекулами рідини квазидискретних шарів. У плівці товщиною два молекулярних діаметри за високих навантажень молекули також упорядковуються паралельно до поверхонь. Отримано часові залежності сили тертя і зміни її середнього значення із навантаженням. У цілому, поведінка розглядуваної моделі узгоджується із експериментами для простих рідин, молекули яких мають сферичну форму.

Виявлено значний вплив рельєфу поверхонь на характер впорядкування молекул плівки води. При цьому рельєф поверхонь якісно не впливає на часові залежності сили тертя і на залежності сили тертя від зовнішнього навантаження.

4. Запропонована теорія дозволяє описати ефекти, що спостерігаються при плавленні ультратонкої плівки мастила в режимі межового тертя. Проведено узгоджений розгляд термодинамічного і зсувного плавлення. Розглянуто залежність сили тертя від швидкості зсуву і темпера-

тури. При високій температурі поверхонь тертя зсувне плавлення настає при меншому значенні швидкості зсуву (зсувних напружень), а при подальшому збільшенні температури мастило плавиться навіть при нульовій швидкості зсуву. У моделі враховано вплив температури, зсувне плавлення і зовнішній тиск. Це головні чинники, що вивчаються експериментально.

Досліджено просту трибологічну систему і отримано часові залежності сили тертя при підвищенні швидкості зсуву, тиску і температури. Показано, що в системі в широкому діапазоні параметрів реалізується переривчастий режим тертя, який спостерігається експериментально. З'ясовано, що тиск впливає на систему нетривіальним чином. Отримані результати якісно збігаються з відомими експериментальними даними. Оскільки модель є кількісною, її модифікації можуть використовуватися для опису конкретних експериментів.

Результати роботи опубліковано у статтях [63–72] та тезах конференцій [73–78].

СПИСОК ДЖЕРЕЛ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учебное пособие : в 10 т. - М.: Наука, 2007. - Т. 5: Статистическая физика. Изд. 2. - 1964. - 568 с.
2. A. V. Khomenko, O. V. Yushchenko, Phys. Rev. E **68**, 036110 (2003).
3. E. N. Lorenz, J. Atmosp. Sci. - 1963. - Vol. 20. - P. 130-141.
4. O. M. Braun, A. G. Naumovets, Surf. Sci. Rep. **60**, 79 (2006).
5. M. L. Gee, P. M. McGuiggan, J. N. Israelachvili, J. Chem. Phys. **93**, 1895 (1990).
6. Мелвин-Хьюз Э. А. Физическая химия. Ч. 1 / [пер. с англ. Е. Еремин и др.]. - М.: Иностран. лит., 1962. - 520 с.
7. Гардинер К. В. Стохастические методы в естественных науках / [пер. с англ. А. Доброславский и др.]. - М.: Мир, 1986. - 528 с.
8. V. E. Shapiro, Phys Rev. E. - 1993. - Vol. 48. - P. 109-120.
9. A. I. Olemskoi, D. O. Kharchenko, I. A. Knyaz', Phys. Rev. E. - 2005. - Vol. 71. - P. 041101 (12).
10. Ван Кампен Н. Г. Стохастические процессы в физике и химии: Пер. с англ. - М.: Высшая школа, 1990. - 376 с.
11. Zinn-Justin J. Quantum Field Theory and Critical Phenomena. - Oxford: Clarendon Press, 1989. - 914 p.
12. A. V. Khomenko, D. O. Kharchenko, O. V. Yushchenko, Вестник Львовского университета. - 2004. - № 37. - С. 44-56.
13. А. И. Олемской, А. В. Хоменко, ЖТФ. - 1996. - Т. 110, № 6(12). - С. 2144-2167.
14. Amit D. J. Field theory, the renormalization group, and critical phenomena. - New York: McGraw-Hill, Inc., 1978. - 336 p.
15. A. V. Khomenko, Phys. Lett. A. - 2004. - Vol. 329, № 1-2. - P. 140-147.
16. Хакен Г. Синергетика / Г. Хакен; [пер. с англ. В. Емельянов]. - М.: Мир, 1980. - 404 с.

17. H. Yoshizawa, Y.-L. Chen, J. Israelachvili, *J. Phys. Chem.* **97**, 4128 (1993); H. Yoshizawa, J. Israelachvili, *J. Phys. Chem.* **97**, 11300 (1993).
18. Реология: Теория и приложения. / Под ред. Ф. Эйриха; [пер. с англ. под общей ред. Ю. Н. Работнова, П. А. Ребиндера]. - М.: Иностран. лит., 1962. - 824 с.
19. J. Israelachvili, *Surf. Sci. Rep.* **14**, 109 (1992).
20. A. L. Demirel, S. Granick, *J. Chem. Phys.* **109**, 6889 (1998).
21. В. Л. Попов, *ЖТФ* **71**, 100 (2001).
22. In: physics of sliding friction / [G. Reiter, A. L. Demirel, J. Peanasky et al]; Eds. B. N. J. Persson, E. Tosatti. - Dordrecht: Kluwer, 1995. - P. 119 - 138.
23. G. Luengo, J. Israelachvili, S. Granick, *Wear* **200**, 328 (1996).
24. I. S. Aranson, L. S. Tsimring, V. M. Vinokur, *Phys. Rev. B.* - 2002. - Vol. 65, № 12. - P. 125402 (7).
25. А. В. Хоменко, Н. В. Проданов, *ФТВД.* - 2006. - Т. 16, № 4. - С. 164 - 179.
26. E. A. Brener, V. I. Marchenko, *JETP Lett.* - 2002. - Vol. 76, № 4. - P. 211 - 214.
27. G. Reiter, A. L. Demirel, J. Peanasky, L. L. Cai, S. Granick, *J. Chem. Phys.* **101**, 2606 (1994).
28. J. Gao, W. D. Luedtke, U. Landman, *J. Phys. Chem.* - 1997. - Vol. 101. - P. 4013 - 4023.
29. S. J. Heo, S. B. Sinnott, D. W. Brenner, J. A. Harrison, In: *Nanotribology and nanomechanics* (Ed. Bhushan B.). - Berlin: Springer, 2005. - P. 623 - 691.
30. P. A. Thompson, M. O. Robbins, *Science.* - 1990. - Vol. 250. - P. 792 - 794.
31. P. A. Thompson, G. S. Grest, M. O. Robbins, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3448 (1992).
32. O. M. Braun, M. Peyrard, *Phys. Rev. E.* - 2001. - Vol. 63. - P. 46110 - 19.
33. Israelachvili J.N. *Intermolecular and surface forces*, 2nd ed. - London: Academic Press, 1998. - 470 p.
34. M. Ruths, A. D. Berman, J. N. Israelachvili, In: *Nanotribology and nanomechanics* (Ed. Bhushan B.). - Berlin: Springer, 2005. - P. 389 - 481.
35. www.webelements.com
36. Rapaport D.C. *The art of molecular dynamics simulation*, 2nd ed. - Cambridge: Cambridge University Press, 2004. - 550 p.

37. Воюцкий С.С. Курс коллоидной химии. Изд. 2-е перераб. и доп. - М.: Химия, 1975. - 512 с.
38. Марч Н., Тоси М. Движение атомов жидкости, пер. с англ. - М.: Металлургия, 1980. - 296 с.
39. B. N. J. Persson, *Sliding friction. Physical principles and applications* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
40. E. D. Smith, M. O. Robbins, M. Cieplak, Phys. Rev. B **54**, 8252 (1996).
41. J. M. Carlson, A. A. Batista, Phys. Rev. E **53**, 4153 (1996).
42. A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, Condens. Matter Phys. **9**, 695 (2006).
43. A. E. Filippov, J. Klafter, M. Urbakh, Phys. Rev. Lett. **92**, 135503 (2004).
44. Z. Tshiprut, A. E. Filippov, M. Urbakh, Phys. Rev. Lett. **95**, 016101 (2005).
45. A. V. Khomenko, N. V. Prodanov, Condens. Matter Phys. **11**, 615 (2008).
46. R. G. Horn, D. T. Smith, W. Haller, Chem. Phys. Lett. **162**, 404 (1989).
47. А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, ЖТФ **75**, 17 (2005).
48. А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, ЖТФ **77**, 137 (2007).
49. A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, Fluct. Noise Lett. **7**, L111 (2007).
50. О. В. Хоменко, Я. О. Ляшенко, Журн. фіз. досл. **11**, 268 (2007).
51. А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, ФТТ **49**, 886 (2007).
52. A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, Phys. Lett. A **366**, 165 (2007).
53. A. Lemaître, J. Carlson, Phys. Rev. E **69**, 061611 (2004).
54. A. Lemaître, Phys. Rev. Lett. **89**, 195503 (2002).
55. Л. С. Метлов, М. М. Мышляев, Докл. Акад. Наук **433**, 477 (2010).
56. L. S. Metlov, Phys. Rev. E **81**, 051121 (2010).
57. Л. С. Метлов, Изв. РАН. Сер. Физ. **72**, 1353 (2008).
58. Л. С. Метлов, МФиНТ **29**, 335 (2007).
59. А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, Л. С. Метлов, МФиНТ **30**, 859 (2008).
60. Л. М. Качанов, *Основы теории пластичности* (Наука, Москва, 1969).

61. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости* (URSS, Москва, 2003).
62. И. Н. Евдокимов, Н. Ю. Елисеев, *Молекулярные механизмы вязкости жидкости и газа. Ч. 1. Основные понятия* (РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина, Москва, 2005).
63. О. В. Хоменко, Я. О. Ляшенко, В. М. Борисюк, *УФЖ* **54**, 1142 (2009).
64. Я. А. Ляшенко, А. В. Хоменко, Л. С. Метлов, *ЖТФ* **80**, 120 (2010).
65. А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, *Трение и износ* **31**, 412 (2010).
66. A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, V. N. Borisyuk, *Fluct. Noise Lett.* **9**, 19 (2010).
67. А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, *ЖТФ* **80**, 27 (2010).
68. Л. С. Метлов, А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, С. Н. Чепульский, *Журнал нано- и электронной физики* **2**, 79 (2010).
69. А. В. Хоменко, Н. В. Проданов, *ФТВД* **19**, 123 (2009).
70. A. V. Khomenko, N. V. Prodanov, *Carbon* **48**, 1234 (2010).
71. N. V. Prodanov, A. V. Khomenko, *Functional Materials* **17**, 230 (2010).
72. N. V. Prodanov, A. V. Khomenko, *Surf. Sci.* **604**, 730 (2010).
73. Я.А. Ляшенко, А.В. Хоменко, Л.С. Метлов, *Динамическая модель плавления тонкого слоя смазки // 1st International Conference for Young Scientists "LOW TEMPERATURE PHYSICS - 2010", 7-11 June, Kharkov, Ukraine, p. 147.*
74. L.S. Metlov, A.V. Khomenko, Ya.A. Lyashenko, M.M. Myshlyayev, E.G. Pashynska, *Stick-slip phenomena of grain boundary slipping at low temperatures // 1st International Conference for Young Scientists "LOW TEMPERATURE PHYSICS - 2010", 7-11 June, Kharkov, Ukraine, p. 151.*
75. A.V. Khomenko, N.V. Prodanov, I.A. Lyashenko, *Atomistic investigation of friction of metallic nanoparticles // "Friction and Adhesion in Nanomechanical Systems" conference 2010, 25-28 October, Saarbrucken, Germany, p. 57.*
76. Я. Ляшенко, О. Хоменко, Л. Метлов, *Термодинамічна модель переривчастих кінетичних режимів межового тертя // Тези доповідей Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРИКА-2010, 19-21 травня, Львів, Україна, с. В12.*

77. I.A. Lyashenko, A.V. Khomenko, L.S. Metlov, Thermodynamics and kinetics of boundary friction // PLMMP-2010, abstracts, 21-24 May, Kyiv, Ukraine, p. 152.
78. Л.С. Метлов, А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко, М.М. Мышляев, Е.Г. Пашинская, Неравновесная эволюционная термодинамика сверхпластичности // Тезисы 11 Международной конференции "Высокие давления-2010. Фундаментальные и прикладные аспекты", 26-30 сентября, Судак, Украина, с. 124.